Ciprian Dariescu
Marina-Aura Dariescu
Ioan Gottlieb

Capitole de bază în Mecanica Cuantică

Microparticule şi câmpuri

III-13277

Casa de Editură
Venus
Iaşi 2007

4-13.271

Capitole de bază în Mecanica Cuantică
Microparticule şi câmpuri

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Casa de Editură Venus Iaşi 2006
Str. Cloşca 28, Iaşi
Tel. 0232-211808
e-mail: tipografia@venus.ro

Ciprian Dariescu, Marina-Aura Dariescu, Ioan Gottlieb

CAPITOLE DE BAZĂ ÎN MECANICA CUANTICĂ
MICROPARTICULE ŞI CÂMPURI

Casa de Editură Venus, Iaşi
404 pg; 21 mm

ISBN: 978-973-756-061-2

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Ciprian Dariescu
Marina–Aura Dariescu
Ioan Gottlieb

Capitole de bază în Mecanica Cuantică Microparticule şi câmpuri

135623
B.C.U. - IASI

Casa de Editură
Venus
Iaşi 2007

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Cuvânt înainte

La sfârşitul secolului XIX şi începutul secolului XX, se conturase clar ideea că fizica avea nevoie de o revizuire majoră. Astfel, tot mai multe fenomene şi experimente, în special cele din lumea microparticulelor, nu mai puteau fi explicate cu ajutorul teoriilor existente. În acest context, Mecanica Cuantică a luat fiinţă şi s-a dezvoltat ca urmare a incapacităţii mecanicii newtoniene şi electromagnetismului de a explica fenomenele ce au loc la scară atomică şi subatomică, cum ar fi, de exemplu, radiaţia corpului negru, capacitatea calorică a solidelor, efectul fotoelectric sau spectrele atomice. În mod similar, teoriile cuantice de câmp, apărute prin fuziunea Mecanicii Cuantice cu Teoria Relativităţii restrânse, aveau să soluţioneze problemele nerezolvate de electrodinamica clasică, oferind o descriere riguroasă a câmpurilor bozonice şi fermionice şi a interacţiunilor dintre acestea.

Acum, când peste tot în lume se aniversează 100 de ani de la elaborarea Teoriei Relativităţii, putem afirma că cele mai multe cunoştinţe fundamentale asupra realităţii şi naturii lumii în care trăim provin din Mecanica Cuantică şi Teoria Relativităţii Generale. Nici o altă teorie, dezvoltată ulterior, nu a atins acelaşi caracter profund gnoseologic, durată de viaţă, impact şi aplicabilitate, majoritatea descoperirilor ultimelor decenii putând fi explicate în termenii fizicii cuantice, gravitaţiei einsteiniene sau teoriilor gauge.

Spre deosebire de Teoria Relativităţii care a fost creaţia unei singure minţi geniale, trecerea de la mecanica newtoniană la descrierea complet neintuitivă oferită de teoriile cuantice s-a făcut treptat, prin contribuţiile remarcabile ale multor fizicieni. Fără a face un istoric al dezvoltării Mecanicii Cuantice, dorim să amintim etapele decisive în evoluţia acestei discipline. Fizica cuantică s-a

BCU "MIHAIL KOGĂLNICEANU" LIBRARY

"născut" în anul 1900, o dată cu formularea, de către M. Planck (laureat Nobel, 1918), a *ipotezei cuantelor de energie*, acestea dovedindu-şi imediat utilitatea în teoria *radiaţiei corpului negru*. Ulterior, această ipoteză a fost preluată de către A. Einstein (laureat Nobel, 1921) pentru explicarea, în 1905, a *efectului fotoelectric* şi apoi, într-o formă ingenios modificată, a fost aplicată, de către N. Bohr (laureat Nobel, 1922), în 1912, la elaborarea primului *model atomic*, ce explica, surprinzător de bine, liniile spectrale ale hidrogenului.

În 1923–1924, L. de Broglie (laureat Nobel, 1929), unul dintre iniţiatorii mecanicii ondulatorii şi ai fizicii cuantice, enunţă ipotezele care îi poartă numele. Prin confirmarea experimentală, în 1927, a caracterului ondulatoriu al microparticulelor, *ipotezele de Broglie*, conceptul de undă asociată şi, în general, *dualismul undă–corpuscul*, devin patrimoniu ştiinţific internaţional.

În 1925, W. Heisenberg (laureat Nobel, 1932) fundamentează *mecanica matriceală* şi prezintă ca primă, dar deosebit de importantă, aplicaţie cuantificarea oscilatorului liniar armonic.

În 1926, E. Schrödinger (laureat Nobel, 1933), prin ecuaţia care îi poartă numele, conferă funcţiei de undă o substanţialitate matematică deosebită, dezvoltă mecanica ondulatorie şi demonstrează efectiv echivalenţa formulării liniar-autoadjunct-operatoriale pe spaţii Hilbert cu formularea matriceală introdusă de W. Heisenberg. Se pun astfel bazele Mecanicii Cuantice.

În acelaşi an, W. Gordon enunţă ecuaţia ce descrie particula scalară relativistă, iar, un an mai târziu, O. Klein *cuplează* la aceasta câmpul electromagnetic. Tot în 1927, prin cuantificarea acestui câmp, de către P. A. M. Dirac (laureat Nobel, 1933), se stabileşte şi primul reper pe calea celei de a doua cuantificări.

În 1928, are loc o adevărată explozie de idei şi rezultate. Astfel, dacă L. de Broglie şi W. Gordon puseseră bazele teoriei ce descrie fizica proceselor din microcosmos, P.A.M. Dirac, P. Jordan, W. Pauli (laureat Nobel, 1945), E. P. Wigner (laureat Nobel, 1963), N. Bohr şi W. Heisenberg o desăvârşesc. Prin descoperirea ecuaţiei care îi poartă numele, P.A.M. Dirac finisează practic

BCU ASTON CENTRE UNIVERSITY LIBRARY

edificiul Mecanicii Cuantice relativiste, justificând spinul 1/2 al electronului, explicând aşa-numita *anomalie de spin* şi prevăzând existenţa *antiparticulelor*. Tot Dirac elaborează, într-un spaţiu liniar abstract, un formalism matematic specific Mecanicii Cuantice şi denumit *formalismul bra-ket*.

Unul dintre cele mai frumoase şi importante rezultate ale Mecanicii Cuantice îl constituie *principiul de incertitudine* sau *principiul lui Heisenberg*. Elaborate în 1927, *relaţiile lui Heisenberg* au arătat că, în microcosmos, mişcarea clasică a unei particule nu poate fi prevăzută în mod exact, noţiunea de traiectorie pierzându-şi sensul. *Relaţiile de nedeterminare*, compatibile atât cu natura duală a microparticulelor, cât şi cu caracterul interactiv al procesului de măsură, au sensul, mult mai profund, de adevărat "cenzor", în microcosmos.

Cu intuiţia sa caracteristică, N. Bohr sesizează că relaţiile canonice de comutare (impuls–coordonată), postulate de W. Heisenberg, au un caracter cu mult mai profund, fiind general valabile pentru variabilele canonice conjugate ale oricărui sistem fizic, de spin întreg. După o perioadă de cercetări intense, el obţine ceea ce astăzi numim *relaţiile de comutare Bohr–Heisenberg* pentru câmpurile bozonice. Acestea se încadrau perfect în metoda generală de cuantificare a sistemelor fizice, dezvoltată, în 1928, de către P. Jordan, W. Pauli şi E.P. Wigner, atât pentru valorile întregi ale spinului, cât şi pentru cele semi-întregi. În esenţă, faţă de *imaginea Schrödinger*, devenită tradiţională în Mecanica Cuantică "ortodoxă", se evidenţia superioritatea *imaginii Heisenberg*. Aceasta permitea, prin integrarea ecuaţiilor canonice Hamilton–Heisenberg, obţinerea observabilelor fundamentale ale sistemului în termenii unor *operatori de ridicare şi coborâre*, în raport cu care se defineau stările cuantice ale sistemului, ca elemente ale unui spaţiu Hilbert abstract, numit *spaţiu Fock*. În 1929, W. Heisenberg şi W. Pauli sintetizează un sistem de axiome şi principii în aşa-numita *metodă canonică de cuantificare*, a cărei funcţionalitate este demonstrată, în 1934, de către W. Pauli şi V.F. Weisskopf, prin cuantificarea câmpului scalar. Astfel, bazele Teoriei Cuantice a Câmpurilor erau definitiv formulate.

A doua jumătate a secolului trecut este denumită *era teoriilor gauge*, ca

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

"teorii universale", capabile să unifice interacţiunile din natură. Ele s-au impus după apariţia, în 1954, a lucrării lui C.N. Yang (laureat Nobel, 1957) şi R. Mills, dominând diverse arii ale fizicii, de la cosmologie până la fizica atomului, fiind bazate pe conceptul de *simetrie*. Despre aceasta S. Weinberg (laureat Nobel, 1979) spunea: *[...] deşi simetriile sunt ascunse privirii, ele există în natură, în stare latentă [...] Poate, în decursul existenţei generaţiei noastre, vom fi capabili să spunem din ce cauză ceea ce vedem în imensitatea universului de galaxii şi particule este, de fapt, inevitabil.* Teoriile *gauge* au schimbat radical imaginea noastră, nu numai despre fizica particulelor elementare, ci şi despre evoluţia Universului, după momentul *Big-Bang*. Ideea formulării unor teorii de câmp pe variatăţi spaţio-temporale generale a fost şi rămâne una dintre priorităţile acestui început de secol, constituindu-se ca un omagiu adresat lui Albert Einstein, ai cărui ultimi 35 ani de viaţă au fost dedicaţi elaborării unei *Mari Teorii de Unificare*.

Lucrarea de faţă, cuprinzând patru părţi şi două Anexe (anexa B conţinând figurile), îşi propune să prezinte, într-o manieră unitară şi accesibilă, bazele Mecanicii Cuantice nerelativiste, precum şi elemente de Mecanică Cuantică relativistă şi Teorii Cuantice de Câmp. Fiind concepută ca un manual dedicat cititorului aflat la început de drum în acest domeniu, cartea se bazează pe lucrarea [28], care a fost revizuită, prin tratarea unor probleme într-o manieră diferită – mai modernă sau mai accesibilă –, şi adăugită cu o serie de aplicaţii. În ceea ce priveşte formalismul matematic al Mecanicii Cuantice, acesta presupune cunoaşterea amănunţită a unor rezultate şi metode din cadrul unor domenii importante ale Matematicii, cum ar fi: teoria grupurilor şi algebrelor, teoria măsurii, ecuaţii diferenţiale, teoria spaţiilor Hilbert, analiză funcţională, teoria fibratelor etc. Celor interesaţi de aceste ultime aspecte, le recomandăm tratatul [26] pentru aprofundarea noţiunilor de *teoria spaţiilor Hilbert*, *spaţiul* $\mathcal{L}^2$ *al funcţiilor pătratic integrabile în sens Lebesgue*, *elemente de teoria operatorilor liniari în spaţii Hilbert*, *operatori autoadjuncţi asociaţi mărimilor fizice fundamentale* şi *proprietăţile acestora relative la ecuaţiile lor de vectori şi valori*

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

B.C.U. „M. EMINESCU" IAŞI
F I Z I C Ă

proprii.

Subliniem faptul că lucrarea cuprinde şi paragrafe dedicate unor noţiuni moderne, dintre care amintim: efectul MASER, grupurile Lie, simetriile interne şi externe, elemente de fizica particulelor elementare şi a interacţiunilor dintre acestea. Considerăm binevenită trecerea la a doua cuantificare şi introducerea unor elemente de Teorii Cuantice de Câmp. În acest sens, prin aplicarea unei metode perturbative, sunt deduse regulile Feynman pentru bozoni şi fermioni şi expresiile amplitudinilor de împrăştiere şi dezintegrare. În sfârşit, cititorul este iniţiat, pe baza exemplului concret al dezintegrării leptonului μ, în calculul ratei de dezintegrare şi a timpului de viaţă al acestei particule.

Prin expunerea sistematică, detaliată şi clară, a noţiunilor fundamentale şi a formalismului matematic, prezenta lucrare constituie un curs complet, pe deplin accesibil studenţilor de la Facultăţile de Fizică, Matematică, de la facultăţile tehnice, precum şi tuturor celor ce doresc să se iniţieze în capitolele de bază ale Mecanicii Cuantice.

Iaşi, Iulie 2007

Prof. univ. dr. Ioan Merches
Facultatea de Fizică
Universitatea "Al. I. Cuza"– Iaşi

Cercetarea autorilor este finanţată din Grantul CNCSIS tip A, COD 1160.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

CUPRINS

I	**FORMALISMUL FUNDAMENTAL**	**13**
1	Ecuaţia Schrödinger	17
2	Formalismul matematic al Mecanicii Cuantice	71
3	Teoria cuantică a momentului cinetic	123
II	**TEORIA PERTURBAŢILOR. PROCESE CUANTICE DE ÎMPRĂŞTIERE. SISTEME DE PARTICULE**	**155**
4	Teoria perturbaţiilor	159
5	Elemente de teoria ciocnirilor	195
6	Sisteme de particule	209
III	**MECANICĂ CUANTICĂ RELATIVISTĂ**	**245**
7	Câmpul scalar	249
8	Câmpul spinorial	267
IV	**A DOUA CUANTIFICARE**	**321**
9	Simetrii	325
10	Elemente de teoria cuantică a câmpurilor	345
	BIBLIOGRAFIE	**373**
	ANEXE	**377**
	Anexa A	379
	Anexa B	393

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Partea I

FORMALISMUL FUNDAMENTAL

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Cuprins

I FORMALISMUL FUNDAMENTAL 13

1 Ecuaţia Schrödinger 17
1.1 Ipotezele lui de Broglie 18
1.2 Ecuaţia Schrödinger atemporală, temporală şi ecuaţia de evoluţie 23
1.2.1 Justificarea ecuaţiilor Schrödinger 23
1.2.2 Ecuaţia de evoluţie 24
1.3 Funcţia de undă 31
1.3.1 Semnificaţia funcţiei de undă 31
1.3.2 Condiţiile de selectare a soluţiilor fizice acceptabile ale ecuaţiei Schrödinger 33
1.4 Aplicaţii ale ecuaţiei Schrödinger 35
1.4.1 Expresia semiclasică a funcţiei de undă 35
1.4.2 Oscilatorul liniar armonic 38
1.4.3 Rotatorul sferic 42
1.4.4 Ionul hidrogenoid 43
1.4.5 Efectul tunel 51
1.4.6 Factorul Gamow 56
1.4.7 Potenţialul Krönig–Penney 58
1.4.8 Baza de principiu a maserului cu amoniac. Modelare cuantică elementară 62

2 Formalismul matematic al Mecanicii Cuantice 71
2.1 Operatori în Mecanica Cuantică 71
2.2 Comutatori 78
2.2.1 Elemente de teoria grupurilor 78
2.2.2 Grupuri şi algebre Lie 80

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

2.2.3 Proprietăţile comutatorilor 83
2.3 Formalismul Dirac 87
2.3.1 Vectori de stare 87
2.3.2 Vectori *bra* şi *ket* 88
2.4 Valoarea medie a unei observabile 93
2.4.1 Definiţia valorii medii 93
2.4.2 Variaţia în timp a valorii medii 93
2.4.3 Teoremele lui Ehrenfest 94
2.4.4 Relaţiile de imprecizie ale lui Heisenberg 95
2.4.5 Aplicaţii 99
2.5 Mecanica matriceală 103
2.5.1 Reprezentarea matriceală a operatorilor 103
2.5.2 Observabile ca matrice 106
2.5.3 Schimbarea reprezentărilor în spaţiul stărilor 107
2.5.4 Derivarea matricelor 111
2.5.5 Exemplu: oscilatorul liniar armonic 113
2.6 Spectrul continuu 116

3 Teoria cuantică a momentului cinetic 123
3.1 Momentul cinetic orbital 123
3.1.1 Observabila moment cinetic orbital 123
3.1.2 Observabila moment cinetic în coordonate sferice 125
3.1.3 Funcţiile şi valorile proprii ale momentului cinetic orbital 129
3.2 Momentul cinetic propriu (spinul) 130
3.2.1 Spinul electronului 130
3.2.2 Spaţiul spin 134
3.2.3 Simetrii interne 136
3.2.4 Ecuaţia lui Pauli 139
3.3 Momentul cinetic total 141
3.3.1 Relaţii de comutatori 141
3.3.2 Funcţiile şi valorile proprii ale momentului cinetic total . 142
3.3.3 Reprezentări matriceale 145
3.4 Aplicaţie la funcţiile şi valorile proprii ale momentelor cinetice . . 149

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Capitolul 1

Ecuaţia Schrödinger

Efortul continuu de înţelegere şi modelare a naturii de la micro- la macrocosmos a condus la dezvoltarea, în secolul XX, a unor noi domenii ale fizicii. Dintre acestea, *fizica cuantelor* (M. Planck, 1900) şi *teoria relativităţii restrânse* (A. Einstein, 1905) au schimbat radical imaginea intuitivă asupra lumii înconjurătoare, pe care ne-o oferea fizica secolului al XIX-lea [16, 39, 46].

Referitor la ipoteza cuantelor de energie, Niels Bohr spunea: *In istoria ştiinţei, au fost puţine evenimente care, în răstimpul scurt al unei generaţii, au avut astfel de consecinţe extraordinare ca descoperirea, de către Planck, a cuantei elementare de acţiune*[1].

Nu vom insista asupra premizelor experimentale şi teoretice care au condus la apariţia fizicii cuantice, le vom aminti doar în treacăt, recomandând cititorului alte lucrări de specialitate în care acestea sunt prezentate în mod detaliat [24, 26, 27]. Astfel, *radiaţia termică şi legile corpului negru* au fost explicate teoretic după introducerea, de către Max Planck, în 1900, a cuantei elementare de energie. *Efectul fotoelectric*, descoperit în 1887, este explicat prin generalizarea, de către Albert Einstein, în 1905, a valabilităţii ipotezei lui Planck, la "cuantele de lumină". Mai târziu, în 1913, Niels Bohr va extinde ipoteza cuantelor şi la constituentul elementar al substanţei, *atomul*, reuşind nu numai să elimine insuficienţele modelului Rutherford, dar şi să realizeze o bună concordanţă cu principiul de combinare Rydberg–Ritz [4].

Desigur, în afară de aceşti trei paşi, consideraţi fundamentali în dezvoltarea

[1]Wirkungsquanten und Naturbeschreibung-Die Naturweissenschaften, vol. 17, 1929, p. 483

BCU "I.C. BRĂTIANU" UNIVERSITY LIBRARY

teoriei cuantelor, se cuvine să amintim *teoria căldurilor specifice* (A. Einstein, 1907 şi P. Debye, 1911) şi *teoria efectului Compton* (elaborată, în mod independent, de A.H. Compton şi P. Debye, 1923), aceasta din urmă introducând expresia *impulsului cuantei de radiaţie.*

1.1 Ipotezele lui de Broglie

În forma sa tradiţională, ipoteza lui Planck poate fi enunţată astfel:

> *Oscilatorul nu poate avea orice energie, spectrul său energetic fiind discret, iar intervalul energiilor consecutive este constant, adică*
>
> $$E_n = E_0 + nh\nu \, .$$

Cu ajutorul acestei ipoteze, Planck reuşea să explice, în mod unitar, legile ce guvernau radiaţia de echilibru a corpului negru. În ceea ce priveşte valoarea constantei ce îi poartă numele, aceasta se determină, împreună cu constanta lui Boltzmann, în raport cu constantele σ (din legea Stefan–Boltzmann) şi B (din legea de deplasare a lui Wien), cunoscute experimental, cu o precizie destul de bună. Astfel, se obţine valoarea *constantei lui Planck*:

$$h = 6,62 \cdot 10^{-34} \, (J \cdot s) \, ,$$

reprezentând, după cum se poate vedea în studiul formei generalizate a relaţiei lui Bohr de cuantificare [26], chiar cuanta elementară de acţiune.

Generalizând ipoteza lui Planck la însăşi structura câmpului electromagnetic, Einstein presupune că radiaţia electromagnetică de frecvenţă ν este un flux de cuante luminoase, denumite ulterior de către Lewis *fotoni*, fiecare transportând energia

$$E = h\nu \, . \tag{1.1}$$

Deşi fundamentată pe aceeaşi relaţie matematică, ipoteza fotonilor este mai radicală decât ipoteza lui Planck, ea introducând, în fizică, ideea cuantificării câmpului electromagnetic, dezvoltată ulterior de către Dirac (1928), Fermi (1932) şi clarificată de către Bleuler şi Gupta (1950) [13]. Prin aplicarea ipotezei

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

cuantelor de lumină, Einstein formulează teoria efectului fotoelectric explicând toate legile experimentale ale acestuia [26].

Pe de altă parte, formulele din Relativitatea Restrânsă pentru energia şi impulsul particulei relativiste libere,

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\,;\quad \vec{p} = \frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}\,, \tag{1.2}$$

ne conduc la

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad \vec{p} = \frac{E\vec{v}}{c^2} \\ &\text{b)}\quad E^2 = c^2\vec{p}^{\,2} + m_0^2 c^4\,. \end{aligned} \tag{1.3}$$

În cazul propagării luminii în vid ($v = c$), relaţia (1.3.a) devine

$$|\vec{p}| = \frac{E}{c}\,, \tag{1.4}$$

punând în evidenţă, în (1.3.b), masa de repaus nulă a fotonului. Înlocuind expresia (1.1) a energiei în (1.4) şi ţinând cont de $c = \lambda\nu$, obţinem modulul vectorului *impuls al fotonului*, exprimat în funcţie de lungimea sa de undă, λ, ca fiind

$$|\vec{p}| = \frac{h\nu}{\lambda\nu} = \frac{h}{\lambda} \tag{1.5}$$

sau, în funcţie de vectorul de undă $|\vec{k}| = 2\pi/\lambda$, ca fiind

$$\vec{p} = \hbar\vec{k}\,, \tag{1.6}$$

unde am introdus constanta redusă a lui Planck, $\hbar = h/2\pi$.

În anul 1920, atât noţiunea de dualitate a luminii cât şi ideea structurii corpusculare a materiei, deci existenţa electronilor şi a nucleeelor atomice, erau deja acceptate. În acest context, fizicianul Louis de Broglie are ideea îndrăzneaţă, şi în acelaşi timp genială, de a atribui materiei şi un caracter ondulatoriu. Astfel, în 1924, el generalizează dualismul undă–corpuscul la particule nerelativiste, cu masa $m = m_0$, aflate în câmp conservativ, de energie totală

$$E = \frac{p^2}{2m} + V$$

BCU "MIHAI EMINESCU" CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi impuls

$$p = \sqrt{2m(E-V)}\,. \tag{1.7}$$

Acestora le va fi ataşată o undă a cărei frecvenţă şi lungime de undă, calculate cu relaţiile (1.1) şi (1.5), vor avea expresiile

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad \nu = \frac{E}{h}\,; \\ &\text{b)}\quad \lambda = \frac{h}{\sqrt{2m(E-V)}}\,, \end{aligned} \tag{1.8}$$

denumite *relaţiile lui de Broglie* [10, 11].

În concluzie, vestitele *ipoteze de Broglie* sunt reprezentate de ecuaţiile:

$$\begin{aligned} &\text{(a)}\quad \hbar\omega = E\,, \text{ unde } \omega = 2\pi\nu\,, \\ &\text{(b)}\quad \hbar\vec{k} = \vec{p}\,, \text{ unde } \hbar = \frac{h}{2\pi}\,,\ |\vec{k}\,| = \frac{2\pi}{\lambda}\,, \end{aligned} \tag{1.9}$$

şi pot fi sintetizate astfel:

- Pulsaţia undei de Broglie este egală cu raportul dintre energia totală relativistă a particulei şi constanta redusă a lui Planck, $\hbar$.
- Vectorul de undă al undei de Broglie este egal cu vectorul tridimensional al impulsului relativist al particulei multiplicat prin inversul constantei reduse a lui Planck.

Utilizând ipotezele de Broglie în expresia generală a unei unde plane,

$$\Psi(\vec{r},t) = A\cos(\omega t - \vec{k}\cdot\vec{r})\,, \tag{1.10}$$

rezultă forma funcţiei de undă de Broglie,

$$\Psi(\vec{r},t) = A\cos\left[\frac{1}{\hbar}(Et - \vec{p}\cdot\vec{r})\right], \tag{1.11}$$

care, în cazul $\vec{p} \neq 0$, are un clar caracter progresiv. Deoarece, în toată Mecanica Cuantică, funcţia de undă este principial complexă, vom scrie expresia undei de Broglie asociate *particulei libere* sub forma

$$\Psi(\vec{r},t) = A\,e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)}\,,\ A \in \mathbf{C}\,, \tag{1.12}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(C este corpul numerelor complexe) unde faza, în sistemul de unităţi fizice cu $\hbar = 1$,

$$\phi(\vec{r}, t) = \vec{p} \cdot \vec{r} - Et \tag{1.13}$$

este definită astfel încât unda plană să se propage în sensul impulsului $\vec{p}$ al particulei. Ultima expresie ne permite determinarea *vitezei de fază*, adică a vitezei de propagare a suprafeţei de fază constantă. Astfel, considerând o particulă ce se deplasează în direcţia axei Oz, adică $\vec{p} \cdot \vec{r} = pz$, rezultă, prin derivarea expresiei fazei în raport cu timpul,

$$\frac{d\phi}{dt} = p\frac{dz}{dt} - E = pu - E\,, \tag{1.14}$$

că suprafeţele de fază constantă,

$$\frac{d\phi}{dt} = 0\,,$$

se deplasează cu viteza de fază a undei de Broglie

$$u = \frac{E}{p}\,,$$

adică

$$\vec{u} = \frac{E}{p^2}\vec{p} = \frac{c^2}{v^2}\vec{v}\,. \tag{1.15}$$

Se observă că viteza de fază este mai mare sau cel puţin egală cu viteza luminii. Acest lucru nu contrazice Teoria Relativităţii Restrânse deoarece energia şi impulsul nu sunt transportate de suprafeţele de fază constantă, ci suprafeţele de egală amplitudine. Viteza de propagare a acestora poartă numele de *viteză de grup* şi este mai mică decât viteza luminii. Se poate arăta, [26], că viteza de grup a undei de Broglie asociate este egală cu viteza particulei relativiste în mişcare inerţială, adică unda de Broglie transportă impuls şi energie prin însăşi particula căreia îi este asociată.

Un prim succes al teoriei lui de Broglie îl reprezintă faptul că expresia lungimii de undă de Broglie asociată oricărui corpuscul în mişcare cu impulsul p ne permite justificarea relaţiei Bohr de cuantificare. Astfel, impunând undei asociate electronului, aflat în mişcare circulară în jurul nucleului, condiţia de fază a întreţinerii mişcării ondulatorii staţionare

$$kl = k2\pi r = 2\pi n\,,\ n \in \mathbf{N}\,, \tag{1.16}$$

BCU "LUCIAN BLAGA" CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi utilizând $k = 2\pi/\lambda$, obţinem relaţia

$$\frac{2\pi r}{\lambda} = n$$

care, prin utilizarea expresiei lungimii de undă de Broglie,

$$\lambda = \frac{h}{p}, \tag{1.17}$$

ne conduce la condiţia Bohr de cuantificare a momentului cinetic orbital,

$$2\pi pr = nh,$$

adică

$$pr = n\hbar. \tag{1.18}$$

Mai mult decât atât, expresia lungimii de undă de Broglie va juca un rol important în interpretarea rezultatelor experimentului Davisson şi Germer, din 1927. Aceştia au studiat reflexia electronilor pe diferite feţe ale unui monocristal de nichel. Rezultatele măsurătorilor au evidenţiat o reflexie selectivă, după direcţii bine precizate. Variind tensiunea de accelerare între $U = 10\ V$ şi $U = 68\ V$, şi implicit energia cinetică a electronilor, $E_c = eU$, s-a obţinut un maxim al intensităţii curentului colector pentru $U = 54\ V$, la un unghi de $\alpha = 50^0$. Din condiţia de maxim a undelor reflectate de planele atomice, dată de relaţia lui Bragg

$$2d \sin\theta = m\lambda, \tag{1.19}$$

cu $m = 1$, $\theta = \pi/2 - \alpha/2$ şi o distanţă interplanară $d = 0,91\,\mathring{A}$, se obţine $\lambda = 1,65\,\mathring{A}$. Acest rezultat este într-o foarte bună concordanţă cu valoarea lungimii de undă de Broglie,

$$\lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_0eU}} = 1,67\,\mathring{A}, \tag{1.20}$$

corespunzătoare impulsului $p = 3,97 \cdot 10^{-24}\ kg \cdot m \cdot s^{-1}$ şi constituie o excelentă confirmare experimentală a justeţei ipotezelor de Broglie, deci a caracterului ondulatoriu al microparticulelor.

FCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

1.2 Ecuaţia Schrödinger atemporală, temporală şi ecuaţia de evoluţie

1.2.1 Justificarea ecuaţiilor Schrödinger

În 1926, Erwin Schrödinger şi-a propus găsirea unei ecuaţii diferenţiale care să includă dualismul undă–corpuscul şi formulează ecuaţia care îi poartă numele şi a cărei justificare o vom prezenta în continuare [20, 43].

În acest scop, pornim de la ecuaţia undelor a lui d'Alembert,

$$\Delta\Psi - \frac{1}{u^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = 0, \tag{1.21}$$

Ψ fiind aici unda ataşată particulei. În cazul unei microparticule într-o stare staţionară, deci cu $E = const.$ sau, din (1.8.a), cu $\nu = const.$, funcţia de undă are forma

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})\, e^{-2\pi i\nu t}, \tag{1.22}$$

iar ecuaţia (1.21), cu

$$\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2} = -4\pi^2\nu^2\Psi, \tag{1.23}$$

devine

$$\Delta\Psi + \left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2\Psi = 0 \tag{1.24}$$

sau, utilizând (1.8.b),

$$\Delta\Psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\Psi = 0\,. \tag{1.25}$$

Relaţia (1.25) reprezintă *ecuaţia Schrödinger pentru funcţia de undă a stărilor staţionare.* Înlocuind în expresia (1.22) a funcţiei de undă, pe $2\pi\nu = \omega = E/\hbar$, obţinem relaţia

$$\Psi = \psi(\vec{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar}Et}, \tag{1.26}$$

care, împreună cu (1.25) ne conduc la *ecuaţia Schrödinger pentru funcţia de amplitudine, $\psi(\vec{r})$, a stărilor staţionare,* adică

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0\,. \tag{1.27}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Tot în 1926, Schrödinger formulează şi *pentru stări nestaţionare* ecuaţia care îi poartă numele. Astfel, rescriem relaţia (1.25) ca fiind

$$\Delta\Psi - \frac{2m}{\hbar^2} V\Psi = -\frac{2m}{\hbar^2} E\Psi \,, \tag{1.28}$$

şi, utilizând (1.26), găsim relaţia

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} E\Psi \;\Rightarrow\; E\Psi = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t} \,, \tag{1.29}$$

cu ajutorul căreia ecuaţia (1.28) capătă forma

$$\Delta\Psi - \frac{2m}{\hbar^2} V\Psi = \frac{2m}{i\hbar}\frac{\partial\Psi}{\partial t} \,, \tag{1.30}$$

cunoscută ca *ecuaţia Schrödinger dependentă de timp.*

Subliniem că raţionamentul de mai sus *justifică* ecuaţiile lui Schrödinger, şi nu constituie o demonstrare a lor. Valabilitatea acestor ecuaţii rezultă prin intermediul multiplelor aplicaţii, verificate experimental, în mod strălucit.

1.2.2 Ecuaţia de evoluţie

În continuare, vom justifica *ecuaţia de evoluţie*, ca ecuaţie fundamentală a Mecanicii Cuantice, ce cuprinde, drept cazuri particulare, ambele ecuaţii Schrödinger deduse în subparagraful precedent. Pentru aceasta, să demonstrăm, mai întâi, că, sub aspect semiclasic, termenul de fază al unei unde de Broglie coincide cu acţiunea fizică a oricărui sistem natural cu f grade de libertate. Pornim de la observaţia că termenul de fază asociat microparticulei libere are expresia

$$\phi(\vec{x}, t) = \vec{p}\cdot\vec{x} - \frac{|\vec{p}|^2}{2m_0}\, t \,,$$

deoarece impulsul şi energia particulei sunt constante, în orice moment t şi în orice punct $\vec{x}$ al spaţiului $\mathbf{R}^3$. În general însă, dacă particula se găseşte într-un câmp exterior de potenţial generalizat $U(x, \dot{x}, t)$, impulsul şi energia acesteia nu mai rămân constante în decursul mişcării. Ca urmare, între două evenimente infinitezimal apropiate, $(x^i, t)_{i=\overline{1,3}}$ şi $(x^i + dx^i, t + dt)_{i=\overline{1,3}}$, termenul de fază al undei asociate particulei va suferi variaţia infinitezimală

$$d\phi(\vec{x}, t) = \vec{p}\cdot d\vec{x} - E\,dt = p_i\, dx^i - E\,dt \,. \tag{1.31}$$

BCU CLUJ / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Această expresie poate fi generalizată la cazul unui sistem fizic cu f grade de libertate, $\{x^a\}_{a=\overline{1,f}}$, privite drept coordonate generalizate, caracterizat de funcţia Lagrange $L(x;\dot{x};t)$. Astfel, înlocuind componentele impulsului mecanic, $\{p_i\}_{i=\overline{1,f}}$, cu impulsurile canonice

$$p_a = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^a}\,, \quad a = \overline{1,f}\,, \tag{1.32}$$

conjugate variabilelor $\{x^a\}_{a=\overline{1,f}}$ şi energia E cu funcţia Hamilton $H(x;p;t)$, avem:

$$d\phi(x^a,t) = p_a\,dx^a - H\,dt\,. \tag{1.33}$$

Pentru a da un sens fizic acestei expresii, să considerăm una dintre traiectoriile posibile ale sistemului, $\gamma(t) : I \subset \mathbf{R} \to \mathbf{R}^f$, dată prin $\{x^a(t) = \gamma(t)\}_{a=\overline{1,f}}$. În lungul acesteia, este valabilă relaţia

$$dx^a = \frac{dx^a}{dt}\,dt = \dot{x}^a\,dt\,, \quad \forall t \in I\,, \quad \gamma \in C^1(I)\,.$$

Astfel, variaţia termenului de fază, între momentele t şi $t + dt$ de-a lungul traiectoriei posibile $\gamma(t)$, are expresia

$$d\phi(x^a,t) = [p_a\,\dot{x}^a - H(x;p;t)]\,dt\,, \text{ cu } p_a = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^a}\,,\ a = \overline{1,f}\,, \tag{1.34}$$

din care, utilizând relaţia de definiţie a funcţiei Hamilton,

$$H(x^a;p_a;t) = p_a\,\dot{x}^a - L(x^a;\dot{x}^a;t)\,,$$

obţinem ecuaţia

$$\frac{d}{dt}\,\phi(x^a(t),t) = L(x^a(t);\dot{x}^a(t);t) \tag{1.35}$$

a cărei soluţie, evaluată prin integrarea între momentul iniţial $t_0 \in I \subset \mathrm{R}$ şi momentul curent $t \in I \subset \mathrm{R}$, în lungul traiectoriei $\gamma(t)$, este

$$\phi(x^a(t),t) = \int_{t_0}^{t} L(x^a(\sigma);\dot{x}^a(\sigma);\sigma)\,d\sigma\,. \tag{1.36}$$

Aceasta reprezintă integrala acţiunii pe arcul de curbă $\gamma(\sigma) : [t_0,\,t] \subset I \to \mathbf{R}^f$ care uneşte punctul iniţial $\{x^a(t_0)\}_{a=\overline{1,f}} = \gamma(t_0)$ cu punctul curent $\{x^a(t)\}_{a=\overline{1,f}} = \gamma(t)$ din $\mathbf{R}^f$, adică

$$\phi(x^a(t),t) = S(x^a(t),t) = \int_{t_0}^{t} L\,(x^a(\sigma);\dot{x}^a(\sigma);\sigma)\,d\sigma\,. \tag{1.37}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Cum acesta este un termen de fază rezultă, în aproximaţia $\Psi_0 = const$, valoarea câmpului *undei de Broglie asociate sistemului natural*, în punctul curent $(x^a(t))_{a=\overline{1,f}}$ al curbei γ din spaţiul $\mathbf{R}^f$ de configuraţie, de forma

$$\begin{aligned}\Psi(x^a(t),t) &= \Psi_0 \exp\left[\frac{i}{\hbar} S(x^a(t),t)\right] = \\ &= \Psi_0 \exp\left[\frac{i}{\hbar}\int_{t_0}^{t} L(x^a(\sigma);\dot{x}^a(\sigma);\sigma)\, d\sigma\right]. \end{aligned} \tag{1.38}$$

Derivând total, în raport cu t, acest set de expresii, obţinem ecuaţiile:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial t} + \dot{x}^a \frac{\partial\Psi}{\partial x^a} = \frac{i}{\hbar}\left[\frac{\partial S}{\partial t}\Psi + \dot{x}^a \frac{\partial S}{\partial x^a}\Psi\right] = \frac{i}{\hbar} L\Psi\,. \tag{1.39}$$

Datorită caracterului fizic arbitrar al curbei $\gamma(t)$, în clasa traiectoriilor posibile $\Gamma = \{\gamma(t) : J \to D, \forall J \subset \mathbf{R}, D \subset \mathbf{R}^f\}$, acestea vor fi valabile, în aproximaţia semiclasică, în toate punctele curente $\{x^a(t)\}_{a=\overline{1,f}}$ ale curbelor din Γ. Ca urmare, având în vedere şi faptul că acţiunea şi funcţia de undă sunt independente de vitezele generalizate $\{\dot{x}^a\}_{a=\overline{1,f}}$, rezultă, prin derivare parţială a ecuaţiilor de mai sus în raport cu $\dot{x}^a$, următoarele relaţii importante pentru justificarea *ecuaţiei de evoluţie*:

$$\frac{\partial\Psi}{\partial x^c} = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial x^c}\Psi = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}^c}\Psi\,,\ c = 1,2,\ldots,f\,. \tag{1.40}$$

Acestea se pot scrie în forma sugestivă

$$p_c\,\Psi = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}^c}\Psi = \frac{\partial S}{\partial \dot{x}^c}\Psi = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial x^c}\,,\ c = 1,2,\ldots,f\,, \tag{1.41}$$

prin scoaterea în evidenţă a impulsului generalizat, p_c, conjugat canonic coordonatei generalizate x^c.

Cu ajutorul acestor relaţii, cele trei ecuaţii din (1.39) iau formele:

$$\begin{aligned} &\text{(a)} \quad \frac{\partial\Psi}{\partial t} = \frac{i}{\hbar}\frac{\partial S}{\partial t}\Psi \\ &\text{(b)} \quad \left[\frac{\partial}{\partial t} + \dot{x}^a\frac{\partial}{\partial x^a} - \frac{i}{\hbar}L\right]\Psi = 0 \\ &\text{(c)} \quad \left[\frac{\partial S}{\partial t} + \left(\frac{\partial S}{\partial x^a}\dot{x}^a - L\right)\right]\Psi = 0\,, \end{aligned} \tag{1.42}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

adică

$$\begin{aligned}
&\text{(a)} \quad -\frac{\partial S}{\partial t}\Psi = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial t} \\
&\text{(b)} \quad \left[\dot{x}^a\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^a}\right) - L\right]\Psi = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial \Psi}{\partial t} \\
&\text{(c)} \quad \left[\frac{\partial S}{\partial x^a}\dot{x}^a - L\right]\Psi = -\frac{\partial S}{\partial t}\Psi\,.
\end{aligned} \tag{1.43}$$

Aceste relaţii au avut rolul fundamental în metoda descoperită de Schrödinger, în 1926, pentru justificarea ecuaţiei de bază a Mecanicii Cuantice şi pentru elaborarea consecventă a formalismului operatorial pe spaţii Hilbert.

Observaţia, cu adevărat remarcabilă, făcută de Schrödinger, constă în faptul că, ieşind din cadrul aproximaţiei semiclasice şi cerând valabilitate generală a relaţiilor de mai sus, la orice moment t, în orice punct $\{x^a\}_{a=\overline{1,f}}$ din $\mathbf{R}^f$ şi pentru orice funcţie de undă Ψ, atunci

$$p_c = \frac{\partial S}{\partial x^c}$$

şi

$$E = -\frac{\partial S}{\partial t}$$

trebuie să aibă expresiile

$$\begin{aligned}
&\text{(a)} \quad p_c = \frac{\partial S}{\partial x^c} = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^c} \\
&\text{(b)} \quad E = -\frac{\partial S}{\partial t} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\,.
\end{aligned} \tag{1.44}$$

Cum $\left\{\frac{\partial}{\partial x^c}, \frac{\partial}{\partial t}\right\}_{c=\overline{1,f}}$ sunt operatori liniari de derivare pe spaţiul funcţiilor derivabile definite pe $\mathbf{R}^f \times \mathbf{R}$, rezultă că aceeaşi proprietate o vor avea şi impulsurile generalizate, p_c, şi energia E. Aceste expresii, adică

$$\begin{aligned}
&\text{(a)} \quad \hat{p}_c = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^c}\,, \quad c = 1, 2, \ldots, f\,, \\
&\text{(b)} \quad \hat{E} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\,,
\end{aligned} \tag{1.45}$$

constituie *relaţiile de definiţie* ale *operatorilor impuls* şi *energie* în Mecanica Cuantică. Asupra acestor operatori vom reveni în capitolul următor, dedicat

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

formalismului matematic al Mecanicii Cuantice. Simbolul *circomflex* va fi utilizat în mod constant, începând din capitolul 2, pentru a sublinia caracterul operatorial al mărimilor astfel accentuate.

În continuare, să ne concentrăm asupra ecuaţiei (1.43.c) care reprezintă, din punct de vedere clasic (omiţând prezenţa funcţiei de undă Ψ), ecuaţia Hamilton–Jacobi, adică

$$H\left(x^a; \frac{\partial S}{\partial x^a}; t\right) = -\frac{\partial S}{\partial t}, \quad a = 1, 2, \ldots, f, \tag{1.46}$$

pentru sistemul considerat. În baza observaţiei lui Schrödinger, rezultă că mărimilor clasice $E = -\frac{\partial S}{\partial t}$ şi $p_a = \frac{\partial S}{\partial x^a}$ le vor corespunde operatorii energie şi, respectiv, impuls astfel încât, hamiltonianului îi va corespunde operatorul hamiltonian,

$$\hat{H} = H\left(x^a; \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^a}; t\right), \tag{1.47}$$

obtinut prin înlocuirea impulsurilor generalizate, din expresia hamiltonianului (clasic), cu expresiile operatoriale corespunzătoare. În urma acestor substituţii generalizatoare, care reprezintă deja forma fundamentală a vestitului *principiu de corespondenţă*, ecuaţia Hamilton–Jacobi ia forma "egalităţii operatoriale"

$$\hat{H} = \hat{E},$$

adică

$$\hat{H}\left(x^a; \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^a}; t\right) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}. \tag{1.48}$$

Din aceasta, prin acţiunea la dreapta a operatorilor asupra unei funcţii Ψ – adică exact aşa cum cere, de fapt, ecuaţia 1.43.c –, rezultă ecuaţia propusă de Schrödinger,

$$\hat{H}\left(x^a; \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^a}; t\right)\Psi(x^a, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi(x^a, t), \; a = \overline{1, f}, \tag{1.49}$$

ca *ecuaţie de evoluţie* a funcţiei de stare $\Psi(x^a, t)$, care descrie stările cuantice ale unui sistem natural, cu un număr finit, f, de grade de libertate.

Odată justificată această ecuaţie dorim să facem câteva precizări:

- În Mecanica Cuantică, în studiul proceselor din microcosmos în care nu au loc transformări ale microobiectelor şi este satisfăcută legea de conservare a numărului acestora, valabilitatea ecuaţiei Schrödinger este **postulată**;

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

- inspectând ecuaţia de evoluţie, observăm că aceasta este exprimată numai în raport cu coordonatele generalizate $\{x^a\}_{a=\overline{1,f}}$ şi timpul t. O asemenea modalitate de exprimare se numeşte *reprezentare de configuraţie*. În cadrul acesteia, operatorii de impuls şi energie au relaţiile de definiţie (1.45), iar operatorii asociaţi coordonatelor generalizate şi timpului se definesc simplu, ca operatori liniari multiplicativi, prin relaţiile:

$$\hat{x}^a\Psi = x^a\,\Psi\,,\quad \hat{t}\Psi = t\Psi\,, \tag{1.50}$$

valabile oricare ar fi Ψ din mulţimea $\mathcal{F}(\mathbf{R}^f \times \mathbf{R})$ a funcţiilor definite pe $\mathbf{R}^f \times \mathbf{R}$. Din punct de vedere formal, relaţiile de mai sus ne arată că, în reprezentarea de configuraţie, operatorii coordonată şi timp coincid, ca expresie, cu mărimile clasice corespunzătoare, adică $\hat{x}^a = x^a$ şi $\hat{t} = t$. Din acest motiv, în capitolele următoare, nu vom accentua cu circomflex coordonatele şi timpul;

- este evident că operatorii introduşi în acest paragraf sunt liniari (vezi relaţiile lor de definiţie). Aşa cum vom demonstra în capitolul următor, deoarece sumarea, înmulţirea cu scalari şi multiplicarea operatorilor, aplicate operatorilor liniari, conservă liniaritatea, operatorul hamiltonian şi ecuaţia de evoluţie sunt eminamente liniare. Deci, Mecanica Cuantică, prin bazele sale, respectă principiul de superpoziţie a stărilor cuantice;

- fiind o ecuaţie diferenţială de ordinul I în raport cu timpul, unicitatea soluţiei sale, $\Psi(x^a,t) \in C^1(t>0) \cap C^0(t \geq 0)$, este asigurată de îndată ce este cunoscută funcţia de stare $\Psi(x^a,t) \in C(\mathbf{R}^f)$, la momentul iniţial $t = 0$. Din punct de vedere matematic, această menţiune, reprezentând formularea problemei Cauchy pentru ecuaţia de evoluţie, este "de la sine înţeleasă". Din punct de vedere fizic (şi filozofic), ea este deosebit de importantă deoarece pune în lumină, într-un cadru general, existenţa şi esenţa determinismului cuantic:

> Cunoaşterea stării iniţiale a sistemului este suficientă pentru determinarea funcţiei de stare a acestuia la orice moment ulterior t, iar cu cât hamiltonianul asociat sistemului oferă o modelare mai exactă a acestuia, cu atât soluţia ecuaţiei de evoluţie va exprima mai bine starea cuantică reală de la momentul t. Principial, această aproximare poate fi oricât de bună şi deci

BCU IAŞI - CENTRUL UNIVERSITAR

nu există un indeterminism în evoluţia funcţiei de stare. Indeterminismul care apare se manifestă în timpul procesului de măsurare a unor mărimi fizice deoarece, în acele momente, datorită interacţiunii sistemului cu aparatul de măsură, funcţia de undă suferă un salt imprevizibil, în urma căruia nu vom mai şti cu certitudine ce valori ale mărimilor măsurate vom obţine. Vom cunoaşte numai probabilităţile diverselor tranziţii şi probabilităţile de realizare a valorilor respective. Odată încheiată măsurătoarea, avem noile valori înregistrate, cunoaştem noua stare a sistemului şi evoluţia ulterioară a acesteia este, din nou, guvernată, determinist, de către ecuaţia de evoluţie.

Asupra aspectelor menţionate mai sus vom reveni în capitolul următor. Deocamdată, să ne întoarcem la corespondenţele evidenţiate de Schrödinger şi să notăm că, în esenţă, ele reprezintă asocierea unor operatori liniari mărimilor fizice fundamentale din Mecanica Hamiltoniană. Prin generalizare, se conturează ideea de a asocia operatori şi celorlalte mărimi cu care operează metoda analitică a teoriei clasice, astfel încât să se obţină un procedeu unitar, cu rol de ghidare în dezvoltarea formalismului operatorial al mecanicii ondulatorii, de cuantificare a mecanicii hamiltoniene. Acesta este *principiul de corespondenţă*:

Dat fiind un sistem natural cu f grade de libertate, $\{x^a\}_{a=\overline{1,f}}$, şi hamiltonianul $H(x^a;\, p_a;\, t)$, oricărei mărimi fizice specifice acestui sistem, $A(x^a,\, p_a,\, t)$, definită nemijlocit în raport cu variabilele dinamice $\{x^a,\, p_a\}_{a=\overline{1,f}}$, i se ataşează un operator liniar $\hat{A}(x^a,\, \hat{p}_a,\, t)$, construit prin substituirea variabilelor dinamice $\{x^a,\, p_a\}$ cu operatorii corespunzători

$$\begin{aligned} \hat{x}^a &= x^a\,; \\ \hat{p}_a &= \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x^a}\,, \quad a=\overline{1,f}\,, \end{aligned}$$

ordonaţi astfel încât operatorul rezultant $\hat{A}$ să fie hermitic, adică

$$\begin{aligned} &\int_{\mathbf{R}^f} \Psi_1^*(x,t)\left[\hat{A}(x,\hat{p},t)\Psi_2(x,t)\right] d^f x = \\ &= \int_{\mathbf{R}^f} \left[\hat{A}(x,\hat{p},t)\Psi_1(x,t)\right]^* \Psi_2(x,t)\, d^f x\,, \end{aligned} \tag{1.51}$$

BCUIASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

oricare ar fi Ψ_1, Ψ_2 din clasa acelor aplicaţii pentru care integralele de mai sus există.

Prin intermediul acestui principiu se obţine o corespondenţă remarcabilă între ecuaţiile satisfăcute de mărimile clasice şi relaţiile dintre operatorii asociaţi acestora, care are profunde implicaţii, după cum vom vedea în capitolul următor, în însăşi elaborarea metodei Mecanicii Cuantice.

1.3 Funcţia de undă

1.3.1 Semnificaţia funcţiei de undă

Preluăm de la cazul luminii formula bine cunoscută

$$\Delta N \simeq I \Delta \tau \,, \tag{1.52}$$

unde ΔN reprezintă numărul de fotoni din elementul de volum $\Delta \tau$, iar I este intensitatea undei luminoase, şi o aplicăm pentru un flux de ΔN particule în elementul de volum $\Delta \tau$, al cărui intensitate este

$$I = |\Psi(\vec{r}, t)|^2 \,. \tag{1.53}$$

Dacă Ψ' este o soluţie a ecuaţiei Schrödinger, atunci, datorită liniarităţii şi omogenităţii, şi $\Psi = c\Psi'$ ($c \in \mathbf{C}$) este, de asemenea, soluţie. Alegem pe c impunând ca

$$\Delta N = |\Psi|^2 \Delta \tau \tag{1.54}$$

şi obţinem următoarea expresie a *densităţii de particule* :

$$\rho = \lim_{\Delta \tau \to 0} \frac{\Delta N}{\Delta \tau} = |\Psi|^2 = \Psi^* \Psi \,. \tag{1.55}$$

În cele ce urmează, vom demonstra că Mecanica Cuantică descrie microprocese în care *numărul de particule se conservă*. Pentru aceasta, înmulţim cu Ψ^* ecuaţia (1.30), scrisă sub forma

$$\frac{\partial \Psi}{\partial t} - \frac{i\hbar}{2m} \Delta \Psi + \frac{i}{\hbar} V \Psi = 0 \,, \tag{1.56}$$

şi cu Ψ conjugata sa hermitică, adică

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial t} + \frac{i\hbar}{2m} \Delta \Psi^* - \frac{i}{\hbar} V \Psi^* = 0 \,. \tag{1.57}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Prin adunarea acestora, obţinem ecuaţia

$$\frac{\partial}{\partial t}(\Psi^*\Psi) + \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\,\Delta\Psi^* - \Psi^*\,\Delta\Psi\right) = 0\,, \tag{1.58}$$

în care identificăm, după compararea cu ecuaţia uzuală de continuitate

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla\cdot\vec{j} = 0\,, \tag{1.59}$$

densitatea ρ dată de (1.55) şi *densitatea de curent*

$$\vec{j} = \frac{i\hbar}{2m}\left(\Psi\,\nabla\Psi^* - \Psi^*\,\nabla\Psi\right). \tag{1.60}$$

În acest caz, ecuaţia (1.59) exprimă *legea de conservare a numărului de particule* din domeniul (D) [5, 50]

$$N_D = \int_{(D)} |\Psi|^2\, d\tau\,. \tag{1.61}$$

În continuare, pentru a defini *starea uniparticulă*, vom reproduce de N ori aceeaşi stare şi vom identifica cu $|\Psi|^2\,\Delta\tau$ numărul cazurilor în care particula este în elementul de volum $\Delta\tau$. Dacă

$$\int_{(R^3)} |\Psi|^2\, d\tau \;<\; +\infty\,, \tag{1.62}$$

atunci se alege constanta c astfel încât să avem relaţia

$$\int \Psi^*\,\Psi\, d\tau = 1\,, \tag{1.63}$$

denumită *condiţie de normare.* De acum înainte, dacă integrala se extinde pe întregul spaţiu $\mathbf{R}^3$, nu vom specifica domeniul de integrare.

În cazul unei singure particule, a cărei funcţie de undă satisface condiţia (1.63), mărimile (1.54), (1.55) şi (1.60) vor avea următoarele semnificaţii fizice:

- $|\Psi|^2\Delta\tau$ este probabilitatea de a găsi particula în volumul $\Delta\tau$,
- ρ este densitatea de probabilitate,
- $\vec{j}$ reprezintă densitatea curentului de probabilitate.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

1.3.2 Condiţiile de selectare a soluţiilor fizice acceptabile ale ecuaţiei Schrödinger

În încheierea acestui paragraf, să prezentăm condiţiile care trebuie impuse funcţiilor de undă.

1. Semnificaţia funcţiei de undă cere ca $\Psi(\vec{x},t) : \mathbf{R}^3 \times \mathbf{R} \to \mathbf{C}$ să fie o funcţie mărginită în orice compact $D \subset \mathbf{R}^3$, la orice moment $t \in \mathbf{R}$, deoarece integrala

$$\mathcal{P}[D](t) = \int_D |\Psi(\vec{x},t)|^2 \, d^3x \tag{1.64}$$

trebuie să fie finită.

2. Soluţia fizică a ecuaţiei Schrödinger trebuie să fie continuă peste tot în domeniul 4-dimensional $\mathbf{R}^3 \times [0,\infty)$. Această condiţie de continuitate spaţio-temporală, cu caracter general, decurge direct din necesitatea valabilităţii universale a ecuaţiei de continuitate.

3. Derivatele parţiale ale funcţiei de undă *la stânga* şi *la dreapta* oricărui punct (x) din $\mathbf{R}^3$ trebuie să fie finite, adică

$$\left\{\left|\frac{\partial\Psi}{\partial x^i}(x^i - 0,t)\right|\right\}_{i=\overline{1,3}} < \infty\,;$$
$$\left\{\left|\frac{\partial\Psi}{\partial x^i}(x^i + 0,t)\right|\right\}_{i=\overline{1,3}} < \infty\,,$$

deoarece altfel, densitatea curentului de probabilitate, $\vec{j}$, va fi lipsită de semnificaţie fizică.

4. Se impune, de asemenea, condiţia de univocitate:

$$\Psi(r,\theta+2k\pi,\varphi+2\ell\pi,t) = \Psi(r,\theta,\varphi,t)\,, \tag{1.65}$$

oricare ar fi $k,\ell \in \mathbf{Z}$ şi $(r,\theta,\varphi,t) \in [0,\infty)\times[0,\pi)\times[0,2\pi)\times\mathbf{R}$.

5. Dacă potenţialul $V(\vec{x},t)$ are, pe mulţimile de măsură nulă din $\mathbf{R}^3$, discontinuităţi de speţa I, atunci soluţia fizic acceptabilă a ecuaţiei Schrödinger este de clasă C^1 peste tot în $\mathbf{R}^3$. Deoarece majoritatea configuraţiilor

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

experimentale, de analiză a diverselor proprietăţi cuantice ale unui microsistem, se încadrează în termenii acestei condiţii, aceasta joacă un rol deosebit în determinarea univocă, în urma integrării ecuaţiei Schrödinger, a funcţiei de stare, $\Psi(\vec{x},t)$, a sistemului.

6. Dacă potenţialul $V(\vec{x},t)$ este de clasă C^0 peste tot în $\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}$, problema integrării ecuaţiei Schrödinger, cu condiţia iniţială

$$\Psi(\vec{x},0) = \lim_{t\to 0} \Psi(\vec{x},t) = \psi_0(\vec{x}) ,$$

cu $\psi_0(\vec{x}) : \mathbf{R}^3 \to \mathbf{C}$ de clasă $C^2(\mathbf{R}^3)$, se încadrează complet în teoria generală a problemei Cauchy pentru ecuaţiile de tip normal parabolic cu coeficienţi complexi. Din aceasta deducem că soluţia $\Psi(\vec{x},t)$ există, este unică şi, în plus, este de clasă $C^2(\mathbf{R}^3) \cap C^1(0,\infty) \cap C^0[0,\infty)$ în spaţiu-timpul $\mathbf{R}^3 \times \mathbf{R}$.

Observăm că, pentru sisteme uniparticulă scalare, nerelativiste şi conservative, deci $V(\vec{x},t) = V(\vec{x})$, ecuaţia Schrödinger pentru funcţia de amplitudine $\psi(\vec{x})$ corespunzătoare stării cuantice staţionare de energie totală E se transcrie sub forma

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + V(\vec{x})\right]\psi(\vec{x}) = E\,\psi(\vec{x}) .$$

Aceasta reprezintă o problemă clasică de determinare a funcţiilor şi valorilor proprii ale operatorului liniar

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_0}\Delta + V(\vec{x}) ,$$

problemă ce constituie unul dintre subiectele capitolului următor.

În încheiere, să discutăm cazul în care avem de-a face cu potenţiale conservative, $V(\vec{x})$, ce satisfac anumite condiţii de periodicitate spaţială. În astfel de situaţii, este normal să impunem ca densitatea de probabilitate, $|\Psi(\vec{x},t)|^2$, să posede acelaşi tip de periodicitate spaţială deoarece, la orice moment t fixat, configuraţia fizică dintr-un punct oarecare, de coordonate (x^1,x^2,x^3), va fi identică cu cea din $(x^1+n_1a, x^2+n_2b, x^3+n_3c)$, cu $n_1,n_2,n_3 \in \mathbf{Z}$. De exemplu, în cazul unidimensional, dacă avem

$$V(x+na) = V(x),\ (\forall)\, n \in \mathbf{Z},$$

BCU ARAD CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

atunci vom impune pătratului funcţiei de amplitudine condiţia de periodicitate

$$|\psi(x+na)|^2 = |\psi(x)|^2 \, , \, (\forall)\, n \in \mathbf{Z} \, , \tag{1.66}$$

din care rezultă aşa numita *condiţie Bloch* pentru funcţia de amplitudine

$$\psi(x+na) = e^{i\chi na}\,\psi(x) \, , \, (\forall)\, n \in \mathbf{Z} \, , \, \chi \in \mathbf{R} \, . \tag{1.67}$$

Mărimea $\hbar\chi$ este cunoscută sub denumirea de *cuasiimpuls*. Notând cu $\psi_\chi(x)$ funcţia de amplitudine a unei microparticule de quasiimpuls $\hbar\chi$ şi energie potenţială spaţial-periodică, putem deduce vestitele *funcţii Bloch* de modulaţie, $u_\chi(x)$, definite prin relaţia

$$\psi_\chi(x) = e^{i\chi x}\, u_\chi(x) \, . \tag{1.68}$$

Acestea se bucură de aceeaşi proprietate de periodicitate ca şi energia potenţială, adică

$$u_\chi(x+na) = u_\chi(x) \, , \, (\forall)\, n \in \mathbf{Z}$$

şi aduc ecuaţia Schrödinger atemporală la forma *ecuaţiei Bloch–Schrödinger*

$$\frac{d^2u_\chi}{dx^2} + 2i\chi\frac{du_\chi}{dx} + \frac{2m_0}{\hbar^2}\left[E(\chi) - \frac{\hbar^2}{2m_0}\chi^2 - V(\chi)\right] u_\chi = 0 \, . \tag{1.69}$$

Este suficient să se efectueze integrarea acestei ecuaţii pe intervalul $[0, a]$ deoarece soluţia $u_\chi : [0, a] \to \mathbf{C}$ admite prelungire prin periodicitate pe toate celelalte intervale $[na, , (n+1)a]$, $(\forall)\, n \in \mathbf{Z}$, ale axei reale $\mathbf{R}$. Prin generalizarea acestor rezultate la cazul unui spaţiu de configuraţie 3-dimensional, s-au pus bazele teoriei cuantice moderne a corpului solid.

1.4 Aplicaţii ale ecuaţiei Schrödinger

Prezenta secţiune este dedicată rezolvării ecuaţiei Schrödinger (1.27) în cazul unor expresii concrete ale energiei potenţiale $V(\vec{r})$.

1.4.1 Expresia semiclasică a funcţiei de undă

Pentru început, să considerăm cel mai simplu exemplu, acela al unei microparticule libere, cu impuls determinat, adică cu

$$V = 0 \, ; \; E = \frac{p^2}{2m} = const. \tag{1.70}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Ecuaţia (1.27), în care am introdus notaţia $k = \sqrt{2mE}/\hbar$, devine

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} + k^2\,\psi = 0 \tag{1.71}$$

conducând, după următoarea separare a variabilelor

$$\psi(x,y,z) = \psi_1(x)\,\psi_2(y)\,\psi_3(z)\,, \tag{1.72}$$

la trei ecuaţii diferenţiale omogene, de ordinul doi, anume

$$\psi_i'' + k_i^2\,\psi_i = 0 \;\;,\; i = 1,\,2,\,3 \tag{1.73}$$

(fără sumare după i) şi la

$$k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = k^2\,. \tag{1.74}$$

Evident, soluţia ecuaţiei (1.73) fiind

$$\psi_i(x_i) = e^{ik_i x_i} \tag{1.75}$$

(fără sumare după i), putem scrie soluţia generală a ecuaţiei Schrödinger pentru stările staţionare sub forma

$$\Psi(\vec{r},t) = A\,e^{i(\vec{k}\cdot\vec{r}-\omega t)}\,,$$

sau

$$\Psi(\vec{r},t) = A\,e^{\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)}\,, \tag{1.76}$$

unde am utilizat relaţiile (1.9),

$$\vec{k} = \frac{\vec{p}}{\hbar}\;;\;\omega = \frac{E}{\hbar}\,.$$

Observăm că termenul de fază din (1.76),

$$\phi(\vec{r},t) = \vec{p}\cdot\vec{r} - \frac{p^2}{2m}\,t\,,$$

coincide cu integrala completă, $S(\vec{r},t)$, a ecuaţiei Hamilton–Jacobi pentru particula liberă. În baza acestei identităţi, soluţia (1.76) a ecuaţiei Schrödinger pentru microparticula liberă capătă forma

$$\Psi(\vec{r},t) = A\,e^{\frac{i}{\hbar}S(\vec{r},t)}\,, \tag{1.77}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

numită *expresia semiclasică a funcţiei de undă.*

Observăm că unda plană se propagă în sensul lui $\vec{p}$, iar alegerea semnului + în faţa termenului $\vec{p}\cdot\vec{r}$ este legată de convenţia de semn − în faţa termenului Et.

Expresia (1.76), împreună cu conjugata sa hermitică

$$\Psi^* = A^* e^{-\frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r}-Et)} \tag{1.78}$$

şi cu derivatele

$$\nabla\Psi = \frac{i\vec{p}}{\hbar}\Psi$$
$$\nabla\Psi^* = -\frac{i\vec{p}}{\hbar}\Psi^*, \tag{1.79}$$

ne permit calculul densităţii curentului de probabilitate. Într-adevăr, înlocuind (1.76, 78, 79) în (1.60) şi ţinând cont de faptul că $|\Psi|^2 = |A|^2$, adică particula liberă poate fi prezentă oriunde în spaţiu cu aceeaşi pondere, vom obţine

$$\vec{j} = \frac{\vec{p}}{m}|A|^2 = \rho\vec{v}\,. \tag{1.80}$$

Pentru studiul stărilor cuantice sferic simetrice ale particulei libere, vom reface calculul de mai sus, lucrând în coordonate sferice. Legea de propagare nedepinzând de direcţie, vom presupune că ψ depinde numai de distanţa r de la origine. Astfel, ecuaţia (1.71) devine

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{d\psi}{dr} + k^2\psi = 0 \tag{1.81}$$

şi poate fi adusă la forma (1.73), adică

$$(r\psi)'' + k^2(r\psi) = 0\,, \tag{1.82}$$

admiţând, deci, soluţia

$$\psi(r) = \frac{A}{r}e^{ikr}\,. \tag{1.83}$$

Expresia funcţiei de undă în exteriorul unei sfere cu centrul în 0 şi raza $\varepsilon > 0$, adică

$$\Psi = \frac{A}{r}e^{\frac{i}{\hbar}(pr-Et)}, \tag{1.84}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

împreună cu conjugata complexă,

$$\Psi^* = \frac{A^*}{r} e^{-\frac{i}{\hbar}(pr-Et)}, \tag{1.85}$$

şi cu derivatele

$$\begin{aligned} \nabla_r \Psi &= \left(-\frac{1}{r} + \frac{ip}{\hbar}\right)\Psi \\ \nabla_r \Psi^* &= \left(-\frac{1}{r} - \frac{ip}{\hbar}\right)\Psi^* \end{aligned} \tag{1.86}$$

ne permit să obţinem următoarele componente:

$$\begin{aligned} j_r &= \frac{i\hbar}{2m}\left(-\frac{2ip}{\hbar}\right)|\Psi|^2 \\ j_\theta &= j_\varphi = 0\,, \end{aligned} \tag{1.87}$$

ale vectorului densităţii curentului de probabilitate

$$\vec{j} = \frac{\vec{p}}{m}\left|\frac{A}{r}\right|^2 \tag{1.88}$$

şi densitatea de probabilitate

$$\rho = \left|\frac{A}{r}\right|^2 . \tag{1.89}$$

1.4.2 Oscilatorul liniar armonic

Oscilatorul armonic liniar clasic este un punct material, de masă m, ce se mişcă pe un segment de dreaptă, sub acţiunea unei forţe elastice, de constantă k. Presupunând că acest segment este orientat după ox şi alegând în origine punctul de aplicaţie al forţei, putem scrie ecuaţia diferenţială a mişcării ca fiind

$$m\frac{d^2x}{dt^2} = -kx \tag{1.90}$$

sau, introducând notaţia

$$\omega^2 = \frac{k}{m}, \tag{1.91}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

unde ω se numeşte *pulsaţie proprie*, avem

$$\frac{d^2x}{dt^2} + \omega^2 x = 0\,. \tag{1.92}$$

Energia potenţială a oscilatorului la elongaţia x,

$$V(x) = -\int_0^x (-kx)\,dx = \frac{1}{2}kx^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\,, \tag{1.93}$$

ne permite să scriem ecuaţia Schrödinger (1.27) sub forma

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\left(E - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi = 0 \tag{1.94}$$

care, utilizând notaţiile

$$\beta^2 = \frac{m\omega}{\hbar}\;;\; \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}\,, \tag{1.95}$$

deci

$$\frac{2mE}{\hbar^2} = \beta^2\varepsilon\,, \tag{1.96}$$

devine

$$\frac{1}{\beta^2}\frac{d^2\psi}{dx^2} + (\varepsilon - \beta^2 x^2)\psi = 0\,. \tag{1.97}$$

Substituţia

$$\xi = \beta x \tag{1.98}$$

aduce ecuaţia (1.97) la forma

$$\psi'' + (\varepsilon - \xi^2)\psi = 0 \;,\text{cu}\;\; \psi' = \frac{d\psi}{d\xi}\,. \tag{1.99}$$

Pentru a stabili soluţiile acestei ecuaţii, să studiem mai întâi comportarea asimptotică a lui ψ, pentru valori foarte mari ale coordonatei (deci $\xi \to \pm\infty$), domenii în care constanta ε nu joacă nici un rol, locul ei putând fi luat de orice constantă. Astfel, soluţia asimptotică $\psi_a(\xi)$ satisface ecuaţia

$$\psi_a'' + (\alpha - \xi^2)\psi_a = 0\,,\;\; \alpha = const. \tag{1.100}$$

care, prin substituţia

$$\psi_a(\xi) = e^{\varphi(\xi)}\,, \tag{1.101}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

devine

$$\varphi'' + \varphi'^2 + (\alpha - \xi^2) = 0\,. \tag{1.102}$$

Cum nu avem restricţii principiale asupra valorii lui α, putem considera $\varphi' = \pm\xi$, adică

$$\varphi = \pm\frac{1}{2}\xi^2 \quad , \text{ cu } \alpha = \mp 1\,, \tag{1.103}$$

deci

$$\psi_a = e^{\pm\frac{1}{2}\xi^2}\,. \tag{1.104}$$

Semnul + de la exponent fiind lipsit de sens fizic, deoarece în acest caz funcţia de undă ar creşte (exponenţial) nelimitat pentru $\xi \to \pm\infty$, vom căuta soluţia exactă a ecuaţiei (1.99) sub forma

$$\psi(\xi) = e^{-\frac{1}{2}\xi^2}\,u(\xi)\,, \quad (\text{deci } \alpha = +1)\,, \tag{1.105}$$

unde $u(\xi)$ trebuie să fie un polinom, pentru a nu avea singularităţi şi a nu altera comportarea asimptotică a funcţiei de undă. Înlocuind (1.105) în (1.99), obţinem ecuaţia diferenţială

$$u'' - 2\xi\,u' + (\varepsilon - 1)u = 0\,, \tag{1.106}$$

care, pentru

$$\varepsilon = 2n + 1\,, \text{ cu } n = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots \tag{1.107}$$

coincide cu ecuaţia diferenţială a *polinoamelor Hermite*, adică $u(\xi) = H_n(\xi)$ (vezi Anexa A.1). În concluzie, soluţia ecuaţiei (1.97) este dată chiar de funcţiile Hermite asociate,

$$\psi_n(x) = C_n\, e^{-\frac{1}{2}\beta^2 x^2}\, H_n(\beta x)\,, \tag{1.108}$$

cu constanta de normare

$$C_n = \left(2^n\, n!\, \frac{\sqrt{\pi}}{\beta}\right)^{-1/2}\,. \tag{1.109}$$

În sfârşit, să observăm că relaţia (1.107), înlocuită în (1.95), ne conduce la o cuantificare a energiei oscilatorului, adică

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,, \tag{1.110}$$

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi pune în evidenţă aşa-numita *energie de zero*

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}\,, \tag{1.111}$$

ce joacă un rol important în fizica temperaturilor joase.

Expresia funcţiei de undă (1.108) ne permite să calculăm probabilitatea cuantică de a găsi particula în intervalul $(x,\, x+dx)$. Astfel, pentru $n=1$, utilizând valoarea particulară $H_1(x)=2x$ (vezi Anexa **A.1**), se obţine:

$$dP_{cuantic}(x) = |\psi_1(x)|^2 = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\beta^3 x^2 e^{-\beta^2 x^2}\,dx\,. \tag{1.112}$$

Din punct de vedere clasic, soluţia ecuaţiei diferenţiale a oscilatorului liniar armonic, ce oscilează cu perioada $T=2\pi/\omega$, este

$$x = A\,\sin(\omega t+\varphi)\,, \tag{1.113}$$

iar energia totală a particulei are expresia

$$E = E_c + V = \frac{m\dot{x}^2}{2} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 = \frac{m\omega^2 A^2}{2}\,. \tag{1.114}$$

Deoarece $E \geq V$, rezultă că particula clasică se poate găsi numai în intervalul $-A \leq x \leq A$, punctele $x=\pm A$, în care energia cinetică este nulă, fiind denumite puncte de întoarcere. Probabilitatea clasică de a găsi particula în intervalul $(x,\, x+dx)$ este [9]

$$\begin{aligned} dP_{clasic}(x) &= 2\frac{dt}{T} = \frac{\omega}{\pi}\frac{dx}{\dot{x}} = \\ &= \frac{\omega}{\pi}\frac{dx}{A\omega\cos(\omega t+\varphi)} = \frac{1}{\pi A}\left(1-\frac{x^2}{A^2}\right)^{-1/2} dx\,. \end{aligned} \tag{1.115}$$

În figura 1.1 (vezi **Anexa B**), se reprezintă grafic probabilităţile cuantică (linia îngroşată) şi clasică, pentru $\beta=1$, $A=2$ şi $n=1$. Se observă că, spre deosebire de probabilitatea clasică ce prezintă creşteri substanţiale în apropierea punctelor de întoarcere, probabilitatea cuantică are o comportare total diferită: ea prezintă două maxime în interiorul intervalului $(-A,\, A)$ şi este diferită de zero şi pentru $|x|>A$, adică în domeniile în care energia cinetică este "negativă". Acest lucru nu reprezintă o contradicţie deoarece, în Mecanica Cuantică,

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

relaţia $E = E_c + V$ îşi pierde interpretarea ei clasică, dat fiind faptul că energiile cinetică şi potenţială (respectiv dependente explicit de impuls şi coordonată) nu pot fi determinate simultan cu o precizie oricât de bună.

Figura 1.2 (din **Anexa B**) corespunde nivelului energetic superior $n = 6$. În limita (clasică) $n \to \infty$, curba ce reprezintă probabilitatea clasică devine înfăşurătoarea vârfurilor curbei probabilităţii cuantice.

1.4.3 Rotatorul sferic

Rotatorul sferic este o particulă ce se mişcă liber pe suprafaţa unei sfere. Astfel, energia potenţială fiind zero şi

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = const. \tag{1.116}$$

ecuaţia Schrödinger (1.27) devine

$$\tilde{\Delta}\psi + \frac{2I}{\hbar^2} E\psi = 0\,, \tag{1.117}$$

unde $I = \mu r^2$ este momentul de inerţie al rotatorului, iar operatorul lui Laplace,

$$\Delta = \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2}\tilde{\Delta}\,, \tag{1.118}$$

s-a redus, în ipoteza (1.116), la expresia operatorului Beltrami pe sfera S^2,

$$\tilde{\Delta} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\,. \tag{1.119}$$

Condiţiile fizice cer ca ecuaţia (1.117) să posede soluţii univoce şi lipsite de singularităţi. Consultând lucrări dedicate ecuaţiilor fizicii matematice [9] şi Anexa **A.3**, constatăm că astfel de soluţii există dacă este satisfăcută condiţia

$$\frac{2IE}{\hbar^2} = l(l+1)\,,\quad l \in \mathbf{N} \tag{1.120}$$

şi ele coincid cu funcţiile sferice $Y_l^m(\theta, \varphi)$.

În consecinţă, rotatorul sferic este descris de ecuaţia (1.117), cu soluţiile

$$\psi(\theta, \varphi) = Y_l^m(\theta, \varphi) = C_l^m\, P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi}\,, \tag{1.121}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

unde P_l^m sunt *funcţiile asociate Legendre*, iar C_l^m sunt constante de normare, obţinute din condiţia

$$\int (Y_l^m)^* \, Y_l^m \, d\Omega = 1 \tag{1.122}$$

ca fiind

$$C_l^m = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \left[\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!} \right]^{1/2}, \tag{1.123}$$

factorul de fază ± 1 urmând să fie justificat în cadrul teoriei momentului cinetic.

Din (1.120) se observă că energia rotatorului este cuantificată,

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1), \tag{1.124}$$

şi se poate demonstra că pentru nici o altă valoare a energiei, diferită de cele date de (1.124), nu există soluţie univocă şi nesingulară a ecuaţiei (1.117).

1.4.4 Ionul hidrogenoid

Ionul hidrogenoid este un sistem cuantic format dintr-un nucleu cu sarcina $+Ze$ – pe care, pentru simplitate, îl vom presupune în repaus în originea reperului ales – şi un electron de masă μ care se mişcă în câmpul electrostatic al nucleului, având enegia potenţială

$$V(r) = -\frac{\lambda}{r}\,, \quad \text{cu} \quad \lambda = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\,. \tag{1.125}$$

Datorită simetriei sferice, este convenabil să scriem ecuaţia Schrödinger (1.27) în coordonate sferice, adică

$$\frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r}\right) + \tilde{\Delta}\psi\right] + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - V(r)\right]\psi = 0\,, \tag{1.126}$$

unde $V(r)$ este dat de (1.125), iar $\tilde{\Delta}$ are expresia (1.119). Înmulţim ecuaţia (1.126) cu r^2/ψ şi, presupunând că funcţia de undă poate fi scrisă sub forma

$$\psi(r, \theta, \varphi) = F(r)\, Y(\theta, \varphi)\,, \tag{1.127}$$

aducem ecuaţia, după o reordonare convenabilă a termenilor, la forma

$$\left\{\frac{1}{F}\frac{d}{dr}\left(r^2 \frac{dF}{dr}\right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2}\left[E - V(r)\right]\right\} + \left\{\frac{1}{Y}\tilde{\Delta}Y\right\} = 0\,. \tag{1.128}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Deoarece prima acoladă depinde numai de r, iar cea de a doua numai de coordonatele unghiulare θ şi φ, suntem obligaţi să considerăm

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad \frac{1}{F}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dF}{dr}\right) + \frac{2\mu r^2}{\hbar^2}\left[E - V(r)\right] = A\,; \\ &\text{b)} \quad \frac{1}{Y}\tilde{\Delta}Y = -A\,. \end{aligned} \tag{1.129}$$

Cum ecuaţia (1.129.b), scrisă sub forma sugestivă

$$\tilde{\Delta}Y + AY = 0\,, \tag{1.130}$$

trebuie să posede soluţii univoce şi lipsite de singularităţi, rezultă pentru A expresia

$$A = l(l+1)\,, \tag{1.131}$$

caz în care regăsim acelaşi tip de ecuaţie ca şi la rotatorul sferic, având drept soluţii

$$Y(\theta, \varphi) = Y_l^m(\theta, \varphi)\,, \tag{1.132}$$

adică funcţiile sferice (1.121) (vezi Anexa **A.3**).

În ceea ce priveşte ecuaţia (1.129.a), aceasta capătă forma

$$\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dF}{dr}\right) + \left[\frac{2\mu E}{\hbar^2} - \frac{2\mu}{\hbar^2}V(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]F = 0 \tag{1.133}$$

care, prin substituţia

$$R(r) = rF(r)\,, \tag{1.134}$$

cu

$$\begin{aligned} r^2F' &= rR' - R\,; \\ (r^2F')' &= R''r\,, \end{aligned} \tag{1.135}$$

devine *ecuaţia radială*

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \left\{\frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - V(r)\right] - \frac{l(l+1)}{r^2}\right\}R = 0\,. \tag{1.136}$$

Efectuând substituţia de adimensionalizare fizică a variabilei radiale,

$$r = a\rho\,, \tag{1.137}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi înlocuind pe $V(r)$ cu expresia (1.125), obţinem ecuaţia

$$R'' + \left[\frac{2\mu E a^2}{\hbar^2} + \frac{2\mu\lambda a}{\hbar^2}\frac{1}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] R = 0\,, \text{ unde } R' = \frac{dR}{d\rho}\,, \tag{1.138}$$

care, după alegerea constantei arbitrare a ca fiind de forma

$$a = \frac{\hbar^2}{\mu\lambda} \tag{1.139}$$

şi introducerea notaţiei

$$\frac{2\mu E a^2}{\hbar^2} = -\varepsilon^2\,, \tag{1.140}$$

devine

$$R'' + \left[-\varepsilon^2 + \frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] R = 0\,. \tag{1.141}$$

Ca şi în cazul oscilatorului armonic, să studiem mai întâi *ecuaţia asimptotică*

$$R_a'' - \varepsilon^2 R_a = 0\,, \tag{1.142}$$

obţinută prin neglijarea termenilor în ρ^{-1} şi ρ^{-2}, faţă de ε. Soluţia asimptotică

$$R_a = A\,e^{\varepsilon\rho} + B\,e^{-\varepsilon\rho} \tag{1.143}$$

pune în evidenţă două cazuri: dacă $E > 0$, atunci, din (1.140), rezultă că ε este pur imaginar, adică este de forma $\varepsilon = i\sigma$, cu σ real, iar soluţia (1.143) este periodică, ea descriind o stare nelegată (deoarece $\lim_{r\to\infty}\psi \neq 0$). În plus, neavând nici o restricţie pentru E, spectrul energetic al electronului este *continuu*.

Dacă $E < 0$, atunci $\varepsilon > 0$, iar condiţia ca soluţia (1.143) să fie mărginită impune $A = 0$, rămânând numai cu partea

$$R_a = e^{-\varepsilon\rho}\,. \tag{1.144}$$

Pentru a integra ecuaţia radială (1.141), vom căuta o soluţie de forma

$$R(\rho) = R_a(\rho)\,u(\rho)\,, \tag{1.145}$$

unde $u(\rho)$ nu alterează comportarea asimptotică. După înlocuire în (1.141), obţinem

$$u'' - 2\varepsilon u' + \left[\frac{2}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2}\right] u = 0\,, \tag{1.146}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

unde am ţinut cont de (1.142) şi (1.144).

Pentru ca această ecuaţie să nu fie singulară în $\rho = 0$, trebuie ca $u(0) = 0$, adică trebuie să avem o soluţie de forma

$$u(\rho) = \rho^p L(\rho)\,, \quad \text{cu} \quad L(0) \neq 0\,, \; p \geq 1\,, \tag{1.147}$$

unde, ca şi în cazul oscilatorului, vom impune ca $L(\rho)$ să fie un polinom. Substituind (1.147) în (1.146), un calcul elementar ne conduce la ecuaţia

$$\rho^2 L'' + 2\rho(p - \varepsilon\rho)L' + \{2\rho(1 - \varepsilon p) + p(p-1) - l(l+1)\}L = 0\,, \tag{1.148}$$

de unde, pentru $\rho = 0$ şi $L(0) \neq 0$, rezultă ecuaţia

$$p(p-1) - l(l+1) = 0\,, \tag{1.149}$$

având soluţiile

$$p_1 = l + 1$$

şi

$$p_2 = -l\,.$$

Rădăcina p_2 nu corespunde condiţiilor fizice, deoarece implică o singularitate în origine. Astfel, vom rămâne cu p_1, adică (1.147) devine

$$u(\rho) = \rho^{l+1} L(\rho)\,, \tag{1.150}$$

iar ecuaţia (1.146) capătă forma

$$\rho L'' + [2(l+1) - 2\varepsilon\rho]L' + [2 - 2\varepsilon(l+1)]L = 0\,. \tag{1.151}$$

Cu ajutorul substituţiei

$$x = 2\varepsilon\rho\,, \tag{1.152}$$

obţinem ecuaţia diferenţială

$$x\frac{d^2L}{dx^2} + (2l + 2 - x)\frac{dL}{dx} + \left(\frac{1}{\varepsilon} - l - 1\right)L = 0\,. \tag{1.153}$$

Comparând ecuaţia (1.153) cu cea satisfăcută de *polinoamele asociate Laguerre* (vezi Anexa A.4), adică

$$x\frac{d^2L_k^{(s)}}{dx^2} + (s + 1 - x)\frac{dL_k^{(s)}}{dx} + k\,L_k^{(s)} = 0\,, \tag{1.154}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

obţinem că

$$s = 2l+1 \ ; \ k = \frac{1}{\varepsilon} - l - 1, \tag{1.155}$$

deci

$$\frac{1}{\varepsilon} = k+l+1 \equiv n \in \mathrm{N}^*, \tag{1.156}$$

adică rezultă

$$k = n-l-1. \tag{1.157}$$

În încheiere, să sintetizăm principalele rezultate.

- Mai întâi, din (1.140, 139), (1.156) şi expresia lui λ din (1.125), rezultă următoarea relaţie de cuantificare a energiei:

$$E_n = -\frac{\mu\lambda^2}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2} = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2}\frac{1}{n^2}, \tag{1.158}$$

punând în evidenţă că, în cazul stărilor legate ale electronului în ionul hidrogenoid, *spectrul energetic* este *discret*, fiecărui număr natural n corespunzându-i energia E_n, dată de (1.158).

- În al doilea rând, ţinând cont de (1.137, 145, 150) şi de soluţia polinomială

$$L(x) = L_{n-l-1}^{(2l+1)}(x) \ ; \ \text{cu } x = \frac{2r}{na}, \tag{1.159}$$

putem scrie forma finală a soluţiei ecuaţiei radiale (1.136), ca fiind

$$R(r) = R_{nl}(r) = C_{nl}\, e^{-\frac{r}{na}} \left(\frac{2r}{na}\right)^{l+1} L_{n-l-1}^{(2l+1)}\left(\frac{2r}{na}\right), \tag{1.160}$$

unde constanta C_{nl} se obţine din condiţia de normare

$$\int_0^\infty (R_{nl})^2 \, dr = 1 \tag{1.161}$$

şi are expresia explicită [36]

$$C_{nl} = \sqrt{\frac{2}{na}} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{2n(n+l)!}}. \tag{1.162}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

- Soluţiile (1.132) şi (1.160) ne permit să scriem expresia funcţiei de amplitudine căutate ca fiind

$$\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi) = \frac{R_{nl}(r)}{r} Y_l^m(\theta,\varphi), \tag{1.163}$$

satisfăcând condiţia de normare care stă la baza interpretării probabilistice dată de Max Born funcţiei de undă,

$$\int |\psi_{nlm}(r,\theta,\varphi)|^2 \, d\tau = 1 \tag{1.164}$$

şi, mai general, condiţia de ortonormare

$$\int \psi^*_{nlm}\psi_{n'l'm'} \, d\tau = \delta_{nn'}\,\delta_{ll'}\,\delta_{mm'}\,. \tag{1.165}$$

- În sfârşit, observăm că, pentru un n fixat, numărul cuantic orbital poate avea valorile $\ell = 0, 1, 2, \ldots, n-1$ şi, pentru fiecare dintre acestea, m va lua $2\ell+1$ valori. Astfel, gradul de degenerare a nivelului de energie E_n va fi

$$\Sigma_{\ell=0}^{n-1}(2\ell+1) = n(n-1)+n = n^2, \tag{1.166}$$

adică funcţiile proprii aparţinând nivelului E_n formează un subspaţiu cu n^2 dimensiuni.

Funcţiile de undă pentru $n = 1, 2, 3$

Expresiile analitice deduse în acest paragraf şi rezultatele prezentate în **Anexa A** ne permit să construim funcţiile de undă ale ionului hidrogenoid, pentru diferite valori ale numerelor cuantice n, ℓ, m. Ca exemplu, prezentăm modul de obţinere al funcţiilor de amplitudine pentru $n = 1$:

$$\begin{aligned}\psi_{100}(r,\theta,\varphi) &= \frac{R_{10}(r)}{r} Y_0^0(\theta,\varphi) = C_{10}\cdot\exp\left(-\frac{r}{a}\right)\cdot\left(\frac{2r}{a}\right)\cdot L_0^{(1)}\cdot\frac{1}{r}\cdot Y_0^0 = \\ &= \frac{1}{\sqrt{a}}\cdot\exp\left(-\frac{r}{a}\right)\cdot\frac{2r}{a}\cdot 1\cdot\frac{1}{r}\cdot\frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\exp\left(-\frac{r}{a}\right); \end{aligned} \tag{1.167}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

pentru $n = 2$:

$$\begin{aligned}
\psi_{200}(r,\theta,\varphi) &= \frac{R_{20}(r)}{r}\, Y_0^0(\theta,\varphi) = \\
&= C_{20}\cdot \exp\left(-\frac{r}{2a}\right)\cdot\left(\frac{2r}{2a}\right)\cdot L_1^{(1)}\cdot\frac{1}{r}\cdot Y_0^0 = \\
&= \frac{1}{2\sqrt{2a}}\cdot\exp\left(-\frac{r}{a}\right)\cdot\frac{r}{a}\cdot\left(2-\frac{2r}{2a}\right)\cdot\frac{1}{r}\cdot\frac{1}{\sqrt{4\pi}} = \\
&= \frac{1}{4\sqrt{2\pi a^3}}\left(2-\frac{r}{a}\right)\exp\left(-\frac{r}{2a}\right); \qquad (1.168)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi_{211}(r,\theta,\varphi) &= \frac{R_{21}(r)}{r}\, Y_1^1(\theta,\varphi) = \\
&= C_{21}\cdot\exp\left(-\frac{r}{2a}\right)\cdot\left(\frac{2r}{2a}\right)^2\cdot L_0^{(3)}\cdot\frac{1}{r}\cdot Y_1^1 = \\
&= \frac{1}{2\sqrt{6a}}\cdot\exp\left(-\frac{r}{2a}\right)\cdot\left(\frac{r}{a}\right)^2\cdot 1\cdot\frac{1}{r}\cdot\left[-\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{i\varphi}\right] = \\
&= -\frac{1}{4\sqrt{4\pi a^3}}\,\frac{r}{a}\exp\left(-\frac{r}{2a}\right)\sin\theta\, e^{i\varphi}; \qquad (1.169)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi_{210}(r,\theta,\varphi) &= \frac{R_{21}(r)}{r}\, Y_1^0(\theta,\varphi) = \\
&= C_{21}\cdot\exp\left(-\frac{r}{2a}\right)\cdot\left(\frac{2r}{2a}\right)^2\cdot L_0^{(3)}\cdot\frac{1}{r}\cdot Y_1^0 = \\
&= \frac{1}{2\sqrt{6a}}\cdot\exp\left(-\frac{r}{2a}\right)\cdot\left(\frac{r}{a}\right)^2\cdot 1\cdot\frac{1}{r}\cdot\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta = \\
&= \frac{1}{4\sqrt{2\pi a^3}}\,\frac{r}{a}\exp\left(-\frac{r}{2a}\right)\cos\theta; \qquad (1.170)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\psi_{21-1}(r,\theta,\varphi) &= \frac{R_{21}(r)}{r}\, Y_1^{-1}(\theta,\varphi) = \\
&= C_{21}\cdot\exp\left(-\frac{r}{2a}\right)\cdot\left(\frac{2r}{2a}\right)^2\cdot L_0^{(3)}\cdot\frac{1}{r}\cdot Y_1^{-1} = \\
&= \frac{1}{2\sqrt{6a}}\cdot\exp\left(-\frac{r}{2a}\right)\cdot\left(\frac{r}{a}\right)^2\cdot 1\cdot\frac{1}{r}\cdot\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\, e^{-i\varphi} = \\
&= \frac{1}{4\sqrt{4\pi a^3}}\,\frac{r}{a}\exp\left(-\frac{r}{2a}\right)\sin\theta\, e^{-i\varphi} \qquad (1.171)
\end{aligned}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi pentru $n = 3$:

$$\begin{aligned}
\psi_{300}(r,\theta,\varphi) &= \frac{R_{30}(r)}{r}\, Y_0^0(\theta,\varphi) = \\
&= C_{30}\cdot \exp\left(-\frac{r}{3a}\right)\cdot\left(\frac{2r}{3a}\right)\cdot L_2^{(1)}\cdot\frac{1}{r}\cdot Y_0^0 = \\
&= \frac{1}{9\sqrt{3\pi a^3}}\left(3-\frac{2r}{a}+\frac{2r^2}{9a^2}\right)\exp\left(-\frac{r}{3a}\right); \qquad (1.172)\\
\psi_{311}(r,\theta,\varphi) &= \frac{R_{31}(r)}{r}\, Y_1^1(\theta,\varphi) = \\
&= C_{31}\cdot \exp\left(-\frac{r}{3a}\right)\cdot\left(\frac{2r}{3a}\right)^2\cdot L_1^{(3)}\cdot\frac{1}{r}\cdot Y_1^1 = \\
&= -\frac{1}{27\sqrt{\pi a^3}}\,\frac{r}{a}\left(2-\frac{r}{3a}\right)\exp\left(-\frac{r}{3a}\right)\sin\theta\, e^{i\varphi}; \qquad (1.173)\\
\psi_{310}(r,\theta,\varphi) &= \frac{R_{31}(r)}{r}\, Y_1^0(\theta,\varphi) = \\
&= C_{31}\cdot \exp\left(-\frac{r}{3a}\right)\cdot\left(\frac{2r}{3a}\right)^2\cdot L_1^{(3)}\cdot\frac{1}{r}\cdot Y_1^0 = \\
&= \frac{2}{27\sqrt{2\pi a^3}}\,\frac{r}{a}\left(2-\frac{r}{3a}\right)\exp\left(-\frac{r}{3a}\right)\cos\theta; \qquad (1.174)\\
\psi_{31-1}(r,\theta,\varphi) &= \frac{R_{31}(r)}{r}\, Y_1^{-1}(\theta,\varphi) = \\
&= C_{31}\cdot \exp\left(-\frac{r}{3a}\right)\cdot\left(\frac{2r}{3a}\right)^2\cdot L_1^{(3)}\cdot\frac{1}{r}\cdot Y_1^{-1} = \\
&= \frac{1}{27\sqrt{\pi a^3}}\,\frac{r}{a}\left(2-\frac{r}{3a}\right)\exp\left(-\frac{r}{3a}\right)\sin\theta\, e^{-i\varphi}; \qquad (1.175)\\
\psi_{322}(r,\theta,\varphi) &= \frac{R_{32}(r)}{r}\, Y_2^2(\theta,\varphi) = \\
&= C_{32}\cdot \exp\left(-\frac{r}{3a}\right)\cdot\left(\frac{2r}{3a}\right)^3\cdot L_0^{(5)}\cdot\frac{1}{r}\cdot Y_2^2 = \\
&= \frac{1}{81\sqrt{4\pi a^3}}\left(\frac{r}{a}\right)^2\exp\left(-\frac{r}{3a}\right)\sin^2\theta\, e^{2i\varphi}; \qquad (1.176)
\end{aligned}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$\psi_{321}(r,\theta,\varphi) = \frac{R_{32}(r)}{r} Y_2^1(\theta,\varphi) =$$
$$= C_{32} \cdot \exp\left(-\frac{r}{3a}\right) \cdot \left(\frac{2r}{3a}\right)^3 \cdot L_0^{(5)} \cdot \frac{1}{r} \cdot Y_2^1 =$$
$$= -\frac{1}{81\sqrt{\pi a^3}} \left(\frac{r}{a}\right)^2 \exp\left(-\frac{r}{3a}\right) \sin\theta \cos\theta\, e^{i\varphi} \; ; \quad (1.177)$$

$$\psi_{320}(r,\theta,\varphi) = \frac{R_{32}(r)}{r} Y_2^0(\theta,\varphi) =$$
$$= C_{32} \cdot \exp\left(-\frac{r}{3a}\right) \cdot \left(\frac{2r}{3a}\right)^3 \cdot L_0^{(5)} \cdot \frac{1}{r} \cdot Y_2^0 =$$
$$= \frac{1}{81\sqrt{6\pi a^3}} \left(\frac{r}{a}\right)^2 \exp\left(-\frac{r}{3a}\right) \left(3\cos^2\theta - 1\right) \; ; \quad (1.178)$$

$$\psi_{32-1}(r,\theta,\varphi) = \frac{R_{32}(r)}{r} Y_2^{-1}(\theta,\varphi) =$$
$$= C_{32} \cdot \exp\left(-\frac{r}{3a}\right) \cdot \left(\frac{2r}{3a}\right)^3 \cdot L_0^{(5)} \cdot \frac{1}{r} \cdot Y_2^{-1} =$$
$$= \frac{1}{81\sqrt{\pi a^3}} \left(\frac{r}{a}\right)^2 \exp\left(-\frac{r}{3a}\right) \sin\theta \cos\theta\, e^{-i\varphi} \; ; \quad (1.179)$$

$$\psi_{32-2}(r,\theta,\varphi) = \frac{R_{32}(r)}{r} Y_2^{-2}(\theta,\varphi) =$$
$$= C_{32} \cdot \exp\left(-\frac{r}{3a}\right) \cdot \left(\frac{2r}{3a}\right)^3 \cdot L_0^{(5)} \cdot \frac{1}{r} \cdot Y_2^{-2} =$$
$$= \frac{1}{81\sqrt{4\pi a^3}} \left(\frac{r}{a}\right)^2 \exp\left(-\frac{r}{3a}\right) \sin^2\theta\, e^{-2i\varphi} \; . \quad (1.180)$$

Aceste expresii au o importanţă deosebită în teoria orbitalilor (vezi [8]).

1.4.5 Efectul tunel

La nivelul unei simple descrieri, *efectul tunel* este o consecinţă directă, eminamente cuantică, a naturii ondulatorii a microparticulelor, care permite acestora străbaterea unor regiuni "clasic interzise", adică trecerea *prin* domenii spaţiale al căror potenţial depăşeşte energia totală a fiecărei microparticule incidente. Cu alte cuvinte, este vorba de obţinerea unui curent *nenul* de probabilitate, la

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

ieşirea dintr-o regiune pe care particula nu ar putea să o străbată dacă ar avea numai caracter corpuscular.

Cel mai simplu model pentru explicarea efectului tunel este oferit de următoarea configuraţie de potenţial:

$$V(x) = \begin{cases} 0 & , \ x \in (-\infty, 0) \\ V_0 > 0 & , \ x \in (0, a) \\ 0 & , \ x \in (a, \infty), \end{cases} \tag{1.181}$$

unde V_0 este *înălţimea*, sau *potenţialul* barierei, iar a este grosimea acesteia. După cum se observă în Figura 1.3 (**Anexa B**), dreapta reală $\{x | \, x \in \mathbf{R}\}$ este împărţită în trei regiuni, notate cu I, II, III şi numite, respectiv, *de incidenţă*, *de barieră* şi *de emergenţă*. Energia E a microparticulei a fost aleasă deliberat mai mică decât energia potenţială V_0, în regiunea de barieră, tocmai pentru a fi în cazul apariţiei efectului tunel. Din punct de vedere clasic (corpuscular), dat fiind caracterul conservativ al energiei, am avea, în regiunea de barieră,

$$E = \frac{1}{2}mv^2 + V_0 < V_0 \ \Leftrightarrow \ \frac{1}{2}mv^2 < 0 .$$

Cum masa m a formelor de materie cunoscute este pozitiv definită, ar rezulta că, în interiorul barierei, viteza particulei este *pur imaginară*, ceea ce este, evident, imposibil. De aceea, zona reprezentată de interiorul barierei se numeşte *regiune clasic interzisă*.

Din punctul de vedere al mecanicii ondulatorii, lucrurile stau cu totul altfel. Notând cu ψ_i, ψ_b, ψ_e cele trei funcţii de amplitudine, definite pe $\mathbf{R}$ cu valori în $\mathbf{C}$, corespunzătoare stărilor cuantice ale microparticulei în cele trei regiuni, avem următoarele forme simple ale ecuaţiei Schrödinger staţionare:

$$\begin{aligned} &\frac{d^2\psi_i}{dx^2} + k^2\,\psi_i = 0 \quad , \quad \text{pentru } x \in (-\infty, 0) \\ &\frac{d^2\psi_b}{dx^2} - q^2\,\psi_b = 0 \quad , \quad \text{pentru } x \in (0, a) \\ &\frac{d^2\psi_e}{dx^2} + k^2\,\psi_e = 0 \quad , \quad \text{pentru } x \in (a, \infty) \end{aligned} \tag{1.182}$$

unde, pentru simplificarea scrierii, am introdus notaţiile

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\,E \ , \ q^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\,(V_0 - E), \tag{1.183}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

reprezentând mărimi *pozitiv* definite. Dată fiind forma simplă a celor trei ecuaţii diferenţiale, integrarea acestora este imediată, obţinându-se soluţiile:

$$\begin{aligned}
\psi_i(x) &= A_1\, e^{ikx} + B_1\, e^{-ikx}\ , \quad x \in (-\infty, 0) \\
\psi_b(x) &= A_2\, e^{qx} + B_2\, e^{-qx}\ , \quad x \in (0, a) \\
\psi_e(x) &= A_3\, e^{ikx}\ , \quad x \in (a, \infty)\,,
\end{aligned} \tag{1.184}$$

unde A_1, B_1, A_2, B_2, A_3 sunt *constante* din $\mathbf{C}$. Modurile $\left\{e^{ikx} \mid k \in \mathbf{R}_+\right\}$ sunt asociate *undei directe*, care este *incidentă* (de la $-\infty$), în regiunea I, şi *emergentă* (spre $+\infty$), în regiunea III. Modurile $\left\{e^{-ikx} \mid k \in \mathbf{R}_+\right\}$ sunt asociate *undei reflectate*, care există numai în regiunea I, călătorind de la $x = 0$ la $x = -\infty$, dat fiind că în regiunea III potenţialul este uniform nul. Justificarea acestei interpretări se face pe baza expresiei (1.60) a densităţii curentului de probabilitate, care pentru undele directe, $A_{(1,3)}e^{ikx}$, devine

$$j_{(1,3)} = \frac{\hbar k}{m}\left|A_{(1,3)}\right|^2\,, \tag{1.185}$$

fiind pozitiv definit şi reprezentând *curentul incident*

$$j_i = \frac{\hbar k}{m}\,|A_1|^2\,, \tag{1.186}$$

în regiunea I, şi cel *emergent*,

$$j_e = \frac{\hbar k}{m}\,|A_3|^2\,, \tag{1.187}$$

în regiunea III. Pentru unda reflectată, de amplitudine B_1, descrisă de modul e^{-ikx}, avem

$$j_r = -\,\frac{\hbar k}{m}\,|B_1|^2\,, \tag{1.188}$$

adică rezultă, într-adevăr, un curent de probabilitate, orientat spre $-\infty$, asociat microparticulei reflectate de peretele $x = 0$ al barierei de potenţial. Astfel, ajungem la posibilitatea caracterizării univoce a efectului tunel, prin intermediul a două mărimi fundamentale, definite prin

$$\begin{aligned}
T &= \frac{j_e}{j_i} = \left|\frac{A_3}{A_1}\right|^2 \\
R &= \frac{j_r}{j_i} = \left|\frac{B_1}{A_1}\right|^2\,,
\end{aligned} \tag{1.189}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

reprezentând *transparenţa* şi, respectiv, *reflectanţa* barierei. Cum aceşti doi coeficienţi sunt formal independenţi de constantele A_2, B_2, estimarea directă a acestora din urmă nu prezintă un interes direct. Ca urmare, prin impunerea condiţiei de racordare, în $x = 0$ şi $x = a$, a funcţiilor de undă şi a derivatelor acestora, adică

$$\begin{aligned} \psi_i(0) &= \psi_b(0) \\ \frac{d\psi_i}{dx}(0) &= \frac{d\psi_b}{dx}(0), \\ \psi_b(a) &= \psi_e(a) \\ \frac{d\psi_b}{dx}(a) &= \frac{d\psi_e}{dx}(a), \end{aligned} \tag{1.190}$$

obţinem sistemul algebric

$$\begin{aligned} A_1 + B_1 &= A_2 + B_2 \\ ik(A_1 - B_1) &= q(A_2 - B_2) \\ e^{qa} A_2 + e^{-qa} B_2 &= e^{ika} A_3 \\ q(e^{qa} A_2 - e^{-qa} B_2) &= ik\, e^{ika} A_3, \end{aligned} \tag{1.191}$$

în care vom căuta eliminarea necunoscutelor A_2, B_2, pentru obţinerea expresiilor

$$\tau = \frac{A_3}{A_1}\ ,\ \rho = \frac{B_1}{A_1}, \tag{1.192}$$

denumite *factor complex de transmisie* şi, respectiv, *factor complex de reflexie*, deoarece avem relaţiile

$$\begin{aligned} T &= \bar{\tau}\tau = |\tau|^2 \\ R &= \bar{\rho}\rho = |\rho|^2. \end{aligned} \tag{1.193}$$

Din împărţirea, membru cu membru, a ultimelor două ecuaţii din (1.191), rezultă expresia

$$\frac{B_2}{A_2} = \frac{q - ik}{q + ik} e^{2qa}, \tag{1.194}$$

care, înlocuită în raportul primelor două ecuaţii din (1.191), adică

$$\frac{1 - \rho}{1 + \rho} = -i \frac{q}{k} \frac{1 - B_2/A_2}{1 + B_2/A_2},$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

conduce, prin rezolvare după ρ şi grupând adecvat termenii, la forma concretă a factorului de reflexie,

$$\rho = -\frac{k^2 + q^2}{(q^2 - k^2) - 2iqk\,\mathrm{cth}(qa)}, \tag{1.195}$$

şi la expresia reflectanţei barierei, adică

$$R = \frac{(q^2 + k^2)^2}{(q^2 - k^2)^2 + 4q^2k^2\,\mathrm{cth}^2(qa)}. \tag{1.196}$$

După cum se observă, R are valori între 0 (pentru $qa \to 0$) şi 1 (pentru $a \to \infty$), desemnând prin urmare o *probabilitate*, şi anume cea de *reflexie* a microparticulei pe *bariera dinte rectangular de potenţial*. Sub aspect fizic, având în vedere expresia locală

$$\frac{dj}{dx} = 0 \;\Leftrightarrow\; j = const. \tag{1.197}$$

a legii de conservare a probabilităţii în Mecanica Cuantică – bazată pe interpretarea statistică Max Born a funcţiei de undă şi pe conservarea numărului de particule – am putea "uita" de restul ecuaţiilor sistemului, deoarece curentul total de probabilitate din regiunea I, $j_I = j_i + j_r$, trebuie să fie egal cu cel emergent, din regiunea III, adică $j_{III} = j_e$. Astfel, în mod cu totul analog relaţiilor din Optică, rezultă

$$R + T = 1 \;\Leftrightarrow\; T = 1 - R\,, \tag{1.198}$$

deci *transparenţa barierei* are expresia explicită

$$T = \frac{4q^2k^2}{4q^2k^2 + (q^2 + k^2)^2\,\mathrm{sh}^2(qa)}, \tag{1.199}$$

având, de asemenea, valori între 1 (pentru $qa \to 0$) şi 0 (pentru $a \to \infty$). Aceasta reprezintă *probabilitatea de tunelare* a barierei rectangulare de potenţial.

Cititorului mai puţin încrezător în acest raţionament, bazat pe conservarea curentului de probabilitate,

$$\frac{\hbar k}{m}\,|A_1|^2 - \frac{\hbar k}{m}\,|B_1|^2 = \frac{\hbar k}{m}\,|A_3|^2 \;\Leftrightarrow\; T = 1 - R, \tag{1.200}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

îi recomandăm să obţină

$$\frac{A_2}{A_1} = (2q)^{-1}[(q+ik)+(q-ik)\rho] \tag{1.201}$$

din primele două ecuaţii (prin eliminarea amplitudinii B_2) şi factorul complex de transmisie,

$$\tau = \frac{A_2}{A_1}\left[e^{qa} + \frac{B_2}{A_2}e^{-qa}\right]e^{-ika}, \tag{1.202}$$

din a treia ecuaţie, ceea ce îl va conduce la expresia

$$\tau = -\frac{2iqk\,e^{-ika}}{(q^2-k^2)\,\mathrm{sh}(qa) - 2iqk\,\mathrm{ch}(qa)}, \tag{1.203}$$

prin înlocuirea rezultatelor $\frac{B_2}{A_2}$, ρ şi $\frac{A_2}{A_1}$. În consecinţă, utilizând (1.193), rezultă expresia (1.199) a transparenţei barierei, ceea ce demonstrează că, într-adevăr, nu există particule care să rătăcească indefinit, prin reflexii multiple, în interiorul zonei tunelate, astfel încât să nu mai fie găsite în regiunea de emergenţă, cu probabilitatea T, sau în regiunea de incidenţă, ca particule reflectate, cu probabilitatea R.

În sfârşit, utilizând (1.183), obţinem formele finale ale relaţiilor (1.196) şi (1.199), adică

$$R = \frac{V_0^2\,\mathrm{sh}^2(qa)}{V_0^2\,\mathrm{sh}^2(qa) + 4E(V_0-E)}; \tag{1.204}$$

$$T = \frac{4E\,(V_0-E)}{V_0^2\,\mathrm{sh}^2(qa) + 4E(V_0-E)}. \tag{1.205}$$

1.4.6 Factorul Gamow

Factorul Gamow reprezintă expresia aproximativă a transparenţei unei bariere de potenţial de formă generală, ca în figura 1.4, din **Anexa B**.

Pentru aflarea transparenţei T se fac următoarele trei ipoteze:

a) presupunem că influenţa energiei potenţiale în regiunile $(-\infty, x_1)$ şi $(x_2, +\infty)$, unde energia E a particulei este mai mare decât $V(x)$, este neglijabilă,

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

b) particula trece succesiv, prin efect tunel, printr-un număr corespunzător de bariere dreptunghiulare elementare, de lărgime $\Delta\xi$, fiecare trecere fiind un eveniment *independent* de celelalte,

c) pentru fiecare barieră dreptunghiulară este valabilă relaţia

$$q\,\Delta\xi \gg 1\,, \quad \text{respectiv} \quad \frac{2m}{\hbar^2}(V-E)(\Delta\xi)^2 \gg 1\,. \tag{1.206}$$

Condiţia (1.206) implică $qa \gg 1$ în expresia (1.205) şi, deoarece E şi V_0 sunt de acelaşi ordin de mărime, putem presupune

$$C = \frac{16E(V_0-E)}{V_0^2} \approx 1\,, \tag{1.207}$$

obţinând, astfel, forma simplificată a relaţiei (1.205), adică

$$T = \frac{C}{(e^{qa}-e^{-qa})^2+C} \approx C\,e^{-2qa}\,. \tag{1.208}$$

Datorită ipotezei a), vom considera numai intervalul (x_1, x_2), pe care îl vom împărţi în N intervale de lungime $\Delta\xi$, fiecare barieră dreptunghiulară astfel obţinută având transparenţa (1.208), adică

$$\Delta T_i \approx C_i\,e^{-2q_i\Delta\xi}\,, \quad \text{cu} \quad q_i^2 = \frac{2m}{\hbar^2}\,[V(\xi_i)-E]\,. \tag{1.209}$$

Ipoteza b) ne permite să scriem transparenţa T ca produsul tuturor factorilor T_i, corespunzători celor N bariere,

$$\begin{aligned} T &\approx \prod_{i=1}^{N}\left\{C_i\,e^{-2q_i\Delta\xi}\right\} = \\ &= \left(\prod_{i=1}^{N} C_i\right)\exp\left\{-2\sum_{i=1}^{N} q_i\Delta\xi\right\} = C\,\exp\left\{-2\sum_{i=1}^{N} q_i\Delta\xi\right\}, \end{aligned} \tag{1.210}$$

şi, aproximând suma de la exponent cu o integrală, obţinem pentru *factorul Gamow* expresia

$$T = C\,\exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_{x_1}^{x_2}\sqrt{2m[V(x)-E]}\,dx\right\}. \tag{1.211}$$

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Pentru un fascicul radial de particule, cu sursa în origine, bariera de potenţial având forma generală $V(r)$, expresia transparenţei, adică

$$T = C \exp\left\{-\frac{2}{\hbar}\int_{r_1}^{r_2}\sqrt{2m[V(r)-E]}\,dr\right\}, \tag{1.212}$$

i-a permis lui G. Gamow, în 1928, să dezvolte teoria elementară a dezintegrării α, obţinând un rezultat în foarte bună concordanţă cu legea empirică Geiger–Nuttall [25].

1.4.7 Potenţialul Krönig–Penney

După cum se cunoaşte experimental şi se poate demonstra în teoria corpului solid, electronul cuasiliber, care se mişcă în potenţialul periodic al reţelei, are energia cuprinsă în anumite intervale energetice, numite *benzi permise*, separate prin intervale complementare, care se numesc *benzi interzise*. Situaţia reală dintr-un corp solid conducând la o ecuaţie ce nu poate fi studiată decât aproximativ, vom considera, în cele ce urmează, cazul ideal al unei reţele monodimensionale, caracterizate de un potenţial periodic, ca în figura 1.5 din **Anexa B**, adică

$$V(x) = \begin{cases} V_0 & , \quad x \in (-b, 0) \\ 0 & , \quad x \in (0, a)\,, \end{cases} \tag{1.213}$$

şi

$$V(x+d) = V(x)\,, \quad \text{cu } d = a+b\,, \tag{1.214}$$

numit *potenţial Krönig–Penney.*

Considerând intervalul $(-b,\, a)$ ca bază, ecuaţiile Schrödinger în cele două regiuni sunt de forma (1.73), cu soluţia

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A\,e^{iqx} + B\,e^{-iqx} & ; \quad \text{pentru } x \in (-b,\, 0) \\ \psi_2(x) = C\,e^{ikx} + D\,e^{-ikx} & ; \quad \text{pentru } x \in (0,\, a) \end{cases} \tag{1.215}$$

unde am introdus notaţiile

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2} \;;\; q^2 = \frac{2m(E-V_0)}{\hbar^2}\,. \tag{1.216}$$

Pentru intervalul $(a,\, a+d)$, funcţia de amplitudine trebuie să satisfacă condiţia (1.67), adică

$$\psi(x) = e^{i\alpha}\,\psi(x-d)\,, \quad \text{pentru } x \in (a,\, a+d)\,, \tag{1.217}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi este de forma

$$\psi(x) = \begin{cases} e^{i\alpha}\,\psi_1(x-d) = e^{i\alpha}\left[A\,e^{iq(x-d)} + B\,e^{-iq(x-d)}\right]; & x \in (a,d) \\ e^{i\alpha}\,\psi_2(x-d) = e^{i\alpha}\left[C\,e^{ik(x-d)} + D\,e^{-ik(x-d)}\right]; & x \in (d,a+d) \end{cases} \tag{1.218}$$

Condiţiile de continuitate ale funcţiei $\psi(x)$ şi ale derivatei sale, $\psi'(x)$, în $x = 0$ şi $x = a$, sunt (vezi şi (1.67)):

$$\begin{aligned} \psi_1(0) &= \psi_2(0) \\ \psi_1'(0) &= \psi_2'(0) \\ e^{i\alpha}\,\psi_1(a-d) &= \psi_2(a) \\ e^{i\alpha}\,\psi_1'(a-d) &= \psi_2'(a)\,, \end{aligned} \tag{1.219}$$

fiind automat satisfăcute şi în rest, datorită periodicităţii. Cu ajutorul relaţiilor (1.215) şi (1.218), ecuaţiile (1.219) conduc la sistemul omogen

$$\begin{aligned} & A + B - C - D = 0 \\ & qA - qB - kC + kD = 0 \\ & e^{i\alpha}\left(Ae^{-iqb} + Be^{iqb}\right) - Ce^{ika} - De^{-ika} = 0 \\ & e^{i\alpha}\left(qAe^{-iqb} - qBe^{iqb}\right) - kCe^{ika} + kDe^{-ika} = 0\,, \end{aligned} \tag{1.220}$$

care admite soluţii nebanale pentru A, B, C şi D dacă

$$\begin{vmatrix} 1 & 1 & -1 & -1 \\ q & -q & -k & k \\ \beta\gamma^{-1} & \beta\gamma & -\delta & -\delta^{-1} \\ q\beta\gamma^{-1} & -q\beta\gamma & -k\delta & k\delta^{-1} \end{vmatrix} = 0\,, \tag{1.221}$$

unde am introdus notaţiile

$$\beta = e^{i\alpha} \;;\; \gamma = e^{iqb} \;;\; \delta = e^{ika}\,. \tag{1.222}$$

Dezvoltarea determinantului ne conduce la o expresie de forma [25]

$$4kq(\beta + \beta^{-1}) = 2kq(\gamma + \gamma^{-1})(\delta + \delta^{-1}) + (k^2 - q^2)(\gamma - \gamma^{-1})(\delta - \delta^{-1})\,, \tag{1.223}$$

sau, substituind β, γ şi δ din (1.222), obţinem relaţia

$$\cos\alpha = \cos(ka)\,\cos(qb) - \frac{k^2+q^2}{2\,kq}\,\sin(ka)\,\sin(qb)\,, \tag{1.224}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

care, datorită faptului că α trebuie să fie real, impune

$$|\cos\alpha| \leq 1\,. \tag{1.225}$$

Condiţia (1.225) nu va fi întotdeauna satisfăcută, conducând, precum vom vedea, la existenţa benzilor permise şi, respectiv, interzise de energie.

Dorim să mai subliniem că, dacă am fi impus în (1.217), nejustificat, condiţia mai tare $\psi(x+d) = \psi(x)$, adică $\alpha = 0$, ecuaţia transcendentă pentru energie (1.224) ar fi condus la un spectru discret, infirmând existenţa benzilor energetice, puse în evidenţă experimental.

a) În cazul $0 < E < V_0$, deoarece $q^2 < 0$, efectuăm înlocuirea

$$q = i\chi\,,\ \ \chi > 0\,,\ \ \chi^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(V_0 - E)\,, \tag{1.226}$$

şi vom obţine, pentru expresia (1.224), forma

$$\cos\alpha = \cos(ka)\,\mathrm{ch}(\chi b) - \frac{k^2-\chi^2}{2k\chi}\sin(ka)\,\mathrm{sh}(\chi b)\,. \tag{1.227}$$

Analizând funcţia din membrul drept, adică

$$\begin{aligned} f(z) \;&=\; \cos z\,\mathrm{ch}(\sqrt{w^2-z^2}\,s) \;+ \\ &+\; \frac{w^2-2z^2}{2z\sqrt{w^2-z^2}}\sin z\,\mathrm{sh}(\sqrt{w^2-z^2}\,s)\,, \end{aligned} \tag{1.228}$$

cu

$$z = ka\ ;\ \ w^2 = \frac{2ma^2V_0}{\hbar^2}\ \ ;\ \ s = \frac{b}{a}\,, \tag{1.229}$$

observăm următoarele: deoarece $f(-z) = f(z)$, este suficient să studiem funcţia $f(z)$ doar pentru $z > 0$. Apoi, în $z = 0$ şi $z = n\pi$ obţinem $|f(z)| > 1$, deoarece

$$\begin{aligned} f(0) &= \mathrm{ch}(ws) > 1 \\ |f(n\pi)| &= \mathrm{ch}\ldots > 1\,. \end{aligned} \tag{1.230}$$

În sfârşit, ecuaţia transcendentă $f(z) = 0$, adică

$$\mathrm{ctg}\,z\,\mathrm{cth}(\sqrt{w^2-z^2}\,s) + \frac{w^2-2z^2}{2z\sqrt{w^2-z^2}} = 0\,, \tag{1.231}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

are rădăcină în fiecare interval $(n\pi, (n+1)\pi)$, deoarece, atunci când z parcurge intervalul, $\mathrm{ctg}\, z$ ia toate valorile reale, de la $-\infty$ la $+\infty$. O analiză numerică, "de model" (cu date potrivit alese pentru w şi s), a ecuaţiei transcendente (1.231) ne conduce la soluţiile

$$z = \{2,5\ ;\ 5,2\ ;\ 8\ ;\ 11\}\,,$$

pentru $z \in (0, 4\pi)$, iar în figura 1.6 (vezi **Anexa B**) am reprezentat funcţia $f(z)$, punând în evidenţă regiunile în care este realizată condiţia (1.225), corespunzând benzilor permise.

b) Şi în cazul $E > V_0$ vom avea benzi permise şi benzi interzise. Pentru a verifica acest lucru, să revenim la relaţia (1.224). Notând membrul drept cu $g(k)$, să arătăm că există valori ale lui k pentru care $g(k) = 0$, şi alte valori pentru care $g(k) > 0$ sau $g(k) < 0$, deoarece, în acest caz, restul raţionamentului coincide cu cel de la cazul anterior. Astfel, pentru prima afirmaţie, observăm că ecuaţia transcendentă $g(k) = 0$ ne conduce la

$$\mathrm{ctg}(ka)\,\mathrm{ctg}(qb) = \frac{k^2+q^2}{2kq}\,, \tag{1.232}$$

care va fi satisfăcută în fiecare interval $(n\pi, (n+1)\pi)$, funcţia $\mathrm{ctg}(ka)$ luând toate valorile, de la $-\infty$ la $+\infty$. În ceea ce priveşte a doua afirmaţie, scriem funcţia $g(k)$ sub forma

$$g(k) = \cos(ka+qb) - \frac{(k-q)^2}{2kq}\sin(ka)\sin(qb)\,, \tag{1.233}$$

pentru a pune în evidenţă punctele

$$\begin{aligned} ka &= n\frac{\pi}{2} - \phi\,, \\ qb &= n\frac{\pi}{2} + \phi\,, \end{aligned} \tag{1.234}$$

în care funcţia

$$g(k) = \cos(n\pi) - \frac{(k-q)^2}{2kq}\left[\sin^2\left(n\frac{\pi}{2}\right)\cos^2\phi - \cos^2\left(n\frac{\pi}{2}\right)\sin^2\phi\right] \tag{1.235}$$

are valorile

$$g(k) = \begin{cases} 1 + \frac{(k-q)^2}{2kq}\sin^2\phi > 1\,, & \text{pentru } n \text{ par} \\ -1 - \frac{(k-q)^2}{2kq}\cos^2\phi < -1\,, & \text{pentru } n \text{ impar}. \end{cases} \tag{1.236}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

1.4.8 Baza de principiu a maserului cu amoniac. Modelare cuantică elementară

După cum se cunoaşte, starea vibraţională de bază a moleculei de amoniac, NH_3 , corespunde oscilaţiei fundamentale a unghiului "la vârf", α, cu valoarea de echilibru $\alpha_0 = 67^o\,58'$, format de oricare din segmentele NH, de lungime $D = 1,014\,\mathring{A}$, cu axa de simetrie de ordin 3, ortogonală pe triunghiul (echilateral) subîntins de cei trei atomi de hidrogen. Prin urmare, la echilibru, distanţa dintre atomul de azot şi planul de bază este $z_0 = D\cos\alpha_0 \approx 0,38\,\mathring{A}$. Studiul spectrului de vibraţie în infraroşu a mai arătat că energia corespunzătoare este $E_0 = 950\,cm^{-1}$ şi poate fi obţinută teoretic ca prima valoare proprie a operatorului Hamilton

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2M}\frac{d^2}{dz^2} + V_{ef}(z)\,. \tag{1.237}$$

Aici, M este masa efectivă, de interacţie, a moleculei de amoniac, pentru un potenţial efectiv, $V_{ef}(z)$, de forma părţii de jos a sticlei de şampanie, cu cele două minime absolute, de zero, în $-z_0$ şi respectiv $+z_0$, iar maximul local, din $z = 0$, are valoarea $V_0 = 2072\,cm^{-1}$. Exact prezenţa acestuia conferă posibilitatea realizării efectului maser. În termeni minimali (dar corecţi, ca explicaţie), este vorba de apariţia, prin *efect tunel*, a unui *cuplaj* între stările cuantice de vibraţie ale moleculei, în fiecare din cele două gropi local parabolice (cu vârfurile în $\mp z_0$), care conduce – faţă de situaţia când gropile ar fi independente, $V_0 \to \infty$ – la *despicarea* nivelului principal, E_0, în *două* subniveluri, separate (energetic) prin $\Delta E = 0,8\,cm^{-1}$. Evident, dacă se are în vedere că, în *convenţia* (energetică a) *numerelor de undă*, $\Delta E = 1/\lambda_{em}$, rezultă $\lambda_{em} = (\Delta E)^{-1} = 1,25\,cm$, deci chiar lungimea de undă a radiaţiei maser (cu amoniac) obţinută, pentru prima oară, de Townes, Gordon şi Zeiger, în 1954.

În teoria sistemului cu *rupere spontană* de simetrie, forma amintită a potenţialului efectiv este deja consacrată şi este descrisă de expresia

$$V_{ef}(z) = V_0\left[\left(\frac{z}{z_0}\right)^2 - 1\right]^2\,. \tag{1.238}$$

Din păcate, integrarea *exactă* (prin quadraturi) a ecuaţiei Schrödinger staţionare (1.27), care devine

$$\frac{d^2\psi}{dz^2} + \frac{2M}{\hbar^2}\left[E - V_0\left(\left(\frac{z}{z_0}\right)^2 - 1\right)^2\right]\psi = 0\,, \tag{1.239}$$

nu este posibilă. Determinarea funcţiilor şi valorilor proprii, $\{\psi, E\}$, se poate efectua *numai* prin *aproximaţii succesive*, ordin cu ordin, în cadrul teoriei cuantice a perturbaţiilor staţionare, pornind, în ordinul zero, de la funcţiile şi valorile proprii

$$\left\{\varphi_n(z)\,,\, E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega_0\right\}_{n\in\mathbb{N}}$$

ale oscilatorului (cuantic) liniar armonic. Pentru ocolirea acestor dificultăţi matematice, se poate introduce o ipoteză simplificatoare – având, evident, tot un caracter de aproximaţie, deoarece faptul în sine rămâne (şi anume că ecuaţia menţionată nu poate fi integrată în formă închisă) –, sugerată de următoarele observaţii esenţiale:

- la $|z| = 2|z_0|$, V_{ef} este deja de 9 ori mai mare decât V_0, ceea ce înseamnă că, la dreapta lui z_0, respectiv la stânga lui $-z_0$, creşterea potenţialului efectiv este suficient de rapidă pentru a putea fi aproximată prin prezenţa a doi pereţi verticali (de înălţime infinită) plasaţi în $z = \pm\ell$, cu $\ell > z_0$ (obligatoriu).

- Deoarece primul nivel de vibraţie, E_0, este situat la *mai puţin* de jumătate din înălţimea maximului local, V_0, iar la $|z| = \frac{1}{2}|z_0|$, V_{ef} atinge deja *mai mult* de jumătate din valoarea V_0, rezultă că acelaşi lucru putem să-l facem în $z = \pm d$, cu $d < z_0$ (obligatoriu), prin plasarea, în fiecare din aceste două puncte, a câte unui perete vertical, de înălţime V_0.

Astfel, ajungem la forma model a potenţialului efectiv reprezentată în figura 1.7, din **Anexa B**. Aceasta ne permite explicitarea, prin quadraturi, a funcţiilor proprii de amplitudine, $\{\psi_\alpha(z)\}_{\alpha=\overline{1,3}}$, cu soluţii ale ecuaţiei Schrödinger staţionare

$$\frac{d^2\psi_\alpha}{dz^2} + \frac{2M}{\hbar^2}\left[E - V_\alpha\right]\psi_\alpha = 0\,,\ \alpha = \overline{1,3}\,, \tag{1.240}$$

şi apoi, determinarea valorilor proprii, E, prin condiţiile standard de "coasere" a soluţiilor în $|z| = d$, odată ce, în $|z| = \ell$, avem $\psi_1(-\ell) = 0 = \psi_3(\ell)$, din cauza saltului *infinit* (pozitiv) al potenţialului $V(z)$, în regiunile $|z| \geq \ell$.

În principiu, trebuie subliniat următorul aspect: din cauza *impreciziei Heisenberg* (ce va fi tratată în paragraful 2.4.4), determinarea cu precizie *absolută* (eroare zero) a valorilor d şi ℓ, faţă de z_0, *simultan* cu măsurarea *exactă* a valorii E_0 a energiei nivelului fundamental (de vibraţie) este *imposibilă*. Prin

urmare, lungimile ℓ, d –sau, după cum vom vedea, cel puţin una dintre ele – trebuie luate drept *constante de model.* Asta înseamnă că identificarea $\ell = 2z_0$ şi $d = z_0/2$ *nu* trebuie considerată în sens *absolut*, ci *numai orientativ*, *singura* condiţie de *consistenţă* care poate fi *impusă* fiind $\ell > z_0$ *simultan* cu $d < z_0$. Odată menţionate aceste aspecte, să trecem la prezentarea rezultatelor matematice ale modelului propus.

Pentru fiecare din cele trei regiuni, soluţiile ecuaţiilor Schrödinger corespunzătoare sunt:

$$\begin{aligned} \psi_1(z) &= \mathcal{C}_+ e^{ikz} + \mathcal{C}_- e^{-ikz}, \\ \psi_2(z) &= B e^{qz} + C e^{-qz}, \\ \psi_3(z) &= \mathcal{D}_+ e^{ikz} + \mathcal{D}_- e^{-ikz}, \end{aligned} \tag{1.241}$$

cu

$$\begin{aligned} k &= \frac{\sqrt{2M}}{\hbar}\sqrt{E}, \\ q &= \frac{\sqrt{2M}}{\hbar}\sqrt{V_0 - E}. \end{aligned} \tag{1.242}$$

Din cauza potenţialului infinit în cele două regiuni extreme, $|z| > \ell$, continuitatea funcţiei de undă în $z = \mp\ell$ implică

$$\begin{aligned} \psi_1(-\ell) &= \mathcal{C}_+ e^{-ik\ell} + \mathcal{C}_- e^{ik\ell} = 0, \\ \psi_3(\ell) &= \mathcal{D}_+ e^{ik\ell} + \mathcal{D}_- e^{-ik\ell} = 0. \end{aligned} \tag{1.243}$$

Cum multiplicarea funcţiei de stare cu un factor de fază *constant nu alterează* densitatea de probabilitate, $|\psi|^2$, cele două ecuaţii pentru $\mathcal{C}_\pm$ şi $\mathcal{D}_\pm$ (respectiv) pot fi rezolvate imediat prin impunerea etalonării

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_+ = \frac{A}{2i} e^{ik\ell} \quad , \quad \mathcal{C}_- = -\frac{A}{2i} e^{-ik\ell}, \\ \mathcal{D}_+ = \frac{D}{2i} e^{-ik\ell} \quad , \quad \mathcal{D}_- = -\frac{D}{2i} e^{ik\ell}, \end{aligned} \tag{1.244}$$

astfel încât, $\psi_{1,3}$ capătă expresiile mai simple:

$$\begin{aligned} \psi_1(z) &= A \sin[k(z+\ell)], \\ \psi_3(z) &= D \sin[k(z-\ell)]. \end{aligned} \tag{1.245}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Acestea, împreună cu ψ_2, conduc la forma concretă a "condiţiilor de racordare" în $z = \mp d$,

$$\begin{aligned} \psi_1(-d) &= \psi_2(-d) \quad ; \quad \psi_2(d) = \psi_3(d) \\ \frac{d\psi_1}{dz}(-d) &= \frac{d\psi_2}{dz}(-d) \quad ; \quad \frac{d\psi_2}{dz}(d) = \frac{d\psi_3}{dz}(d) \end{aligned} \tag{1.246}$$

şi anume,

$$\begin{aligned} e^{-qd}B + e^{qd}C &= A\sin[k(\ell-d)] \\ qe^{-qd}B - qe^{qd}C &= kA\cos[k(\ell-d)]\,, \text{ in } z=-d\,, \\ e^{qd}B + e^{-qd}C &= -D\sin[k(\ell-d)] \\ qe^{qd}B - qe^{-qd}C &= kD\cos[k(\ell-d)]\,, \text{ in } z=d\,. \end{aligned} \tag{1.247}$$

Din cauza "formei algebrice destul de simetrice" a celor două perechi de ecuaţii, pentru stabilirea expresiei concrete a "ecuaţiei seculare" (pentru valorile proprii E ale energiei), $\Delta[E] = 0$, vom evita calcularea determinantului de ordin 4, $\Delta[k(E), q(E)]$, format de coeficienţii factorilor de amplitudine A, B, C, D, prin următorul artificiu: Notând cu ρ raportul C/B şi împărţind prima cu a doua ecuaţie din fiecare pereche, rezultă:

$$\begin{aligned} \frac{e^{2qd}\rho+1}{e^{2qd}\rho-1} &= -\frac{q}{k}\,\mathrm{tg}[k(\ell-d)]\,, \\ \frac{e^{-2qd}\rho+1}{e^{-2qd}\rho-1} &= \frac{q}{k}\,\mathrm{tg}[k(\ell-d)] \end{aligned} \tag{1.248}$$

ceea ce conduce la ecuaţia pentru ρ,

$$\frac{e^{2qd}\rho+1}{e^{2qd}\rho-1} + \frac{e^{-2qd}\rho+1}{e^{-2qd}\rho-1} = 0\,, \tag{1.249}$$

adică

$$(e^{2qd}\rho+1)(e^{-2qd}\rho-1) + (e^{2qd}\rho-1)(e^{-2qd}\rho+1) = 0\,, \tag{1.250}$$

din care obţinem imediat

$$\rho^2 = 1\,, \text{ deci } \rho_- = -1 \text{ sau } \rho_+ = 1\,. \tag{1.251}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Prin simplitatea lor, aceste două valori indică un aspect fizic esenţial în ceea ce priveşte *posibilitatea* obţinerii efectului MASER. Pentru $\rho_+ = 1$, funcţia de amplitudine, $\psi_2(z) \sim \mathrm{ch}(qz)$, este *simetrică* şi la fel vor fi stările cuantice ale sistemului în raport cu reflexia (spaţială) faţă de origine. Ecuaţia valorilor permise ale energiei acestor stări, E_S, capătă forma concretă:

$$\mathrm{tg}\,[k_S(\ell - d)] = -\frac{\mathrm{cth}(q_S d)}{q_S}\, k_S\,, \quad \text{unde} \quad \begin{cases} k_S = \hbar^{-1}\sqrt{2ME_S} \\ q_S = \hbar^{-1}\sqrt{2M(V_0 - E_S)}\,. \end{cases} \tag{1.252}$$

Pentru $\rho = -1$, avem $\psi_2(z) \sim \mathrm{sh}(qz)$, şi deci stările vor fi *antisimetrice*, iar ecuaţia valorilor permise, E_A, devine explicit

$$\mathrm{tg}\,[k_A(\ell - d)] = -\frac{\mathrm{th}(q_A d)}{q_A}\, k_A\,, \quad \text{unde} \quad \begin{cases} k_A = \hbar^{-1}\sqrt{2ME_A} \\ q_A = \hbar^{-1}\sqrt{2M(V_0 - E_A)}\,. \end{cases} \tag{1.253}$$

Experimental, după cum am văzut, separarea energetică a celor două tipuri de stări vibraţionale (fundamentale) ale moleculei de amoniac, $\Delta E = |E_A - E_S|_0 = 0,8\,cm^{-1}$, este foarte mică, în raport cu $E_0 = 950\,cm^{-1}$. Astfel, valorile $q_{S,A}$ sunt *foarte* apropiate de $q_0 = \hbar^{-1}\sqrt{2M(V_0 - E_0)}$ şi, cum

$$\frac{\mathrm{cth}(q_0 d)}{\mathrm{th}(q_0 d)} = \left[\frac{e^{q_0 d} + 1}{e^{q_0 d} - 1}\right]^2 > 1\,,$$

cu $d > 0$, rezultă, într-adevăr (din cele două ecuaţii de valori proprii), că nivelul E_A este cu foarte puţin deasupra nivelului E_S. Astfel, pentru obţinerea unui maser pe $1,25\,cm$ (lungime de undă) nu mai rămâne de realizat decât *inversia de populaţie* între cele două niveluri, adică numărul de molecule N_A, situate pe nivelul E_A, să fie *mai mare* decât numărul N_S al celor aflate pe nivelul E_S. Profitând de valoarea mică a lui ΔE şi de faptul că momentul electric dipolar al moleculei de amoniac este nenul, inversia de populaţie a fost obţinută, iniţial, în 1954 (de către C.H. Townes *et al.*), prin *separarea* dipolar electrică, în câmp *neomogen* (la temperatură scăzută), a moleculelor *up*, cu azotul deasupra planului hidrogenilor, de cele de tip *down* având, evident, atomul de azot plasat în $-z_0$, sub planul atomilor de hidrogen.

Din cele tocmai prezentate, a rezultat – deocamdată, mai mult calitativ – că prezenţa barierei (de înălţime finită, V_0), între $-d$ şi d, conduce (într-adevăr) la despicarea nivelului fundamental E_0 în două subniveluri E_S, E_A

corespunzătoare celor două tipuri de stări – simetrice, respectiv antisimetrice – în care se poate găsi sistemul. Deoarece ambele ecuaţii de valori proprii sunt puternic *transcendente*, estimarea *directă* a soluţiilor $E_{S,A}$ este posibilă numai prin *metode numerice* – prin aproximaţii succesive, cu o precizie oricât de bună – şi asta în ipoteza în care am cunoaşte exact valorile masei efective – de vibraţie – M şi cele două distanţe d, ℓ unde am efectuat "trunchierea" potenţialului $V_{ef}(z)$. Dar, după cum am văzut, din cauza principiului Heisenberg, distanţele de referinţă $d = z_0/2$, $\ell = 2z_0$ nu pot fi considerate *decât orientativ*. În ceea ce priveşte masa efectivă, lucrurile sunt, de asemenea, complicate. Mişcarea de care ne ocupăm este doar una dintre toate mişcările de vibraţie posibile ale moleculei de amoniac. Dacă triunghiul de bază ar fi fost subîntins de atomi mult mai grei decât azotul atunci, cu foarte bună precizie, M ar fi coincis cu masa azotului. Aşa însă, cu trei atomi, fiecare de 14 ori mai uşor decât azotul, probabil că cea mai bună alegere rămâne $M = \frac{3\cdot 14}{14+3}\, m_H$, adică masa redusă a oscilatorului dezechilibrat masic format din atomul de azot, pe de o parte, şi centrul de masă $(3\, m_H)$ al triunghiului hidrogenilor, pe de altă parte. Totuşi, din fericire, valorile experimentale pentru z_0, V_0, E_0 şi ΔE, împreună cu forma *concretă* a ecuaţiilor pentru $E_{S,A}$, permit evitarea acestor dificultăţi şi, mai mult chiar, conferă acestui model elementar capacităţi predictive în acord cu condiţia de consistenţă $d < z_0$, $\ell > z_0$. Astfel, prezenţa, în membrul drept, a termenului $k_{S,A}/q_{S,A}$ elimină, pentru moment, problema masei de vibraţie şi sugerează să facem acelaşi lucru şi în membrul stâng. Deoarece $0 < \frac{\Delta E}{E_0} \ll 1$, mărimile $q_{S,A}$ coincid practic cu $q_0 = \hbar^{-1}\sqrt{2M(V_0 - E_0)}$ şi astfel, introducând factorul de scală $S = \ell/d - 1$ şi parametrul fizic adimensional $\mu = q_0 d$, cele două ecuaţii de valori proprii pot fi scrise (respectiv) sub forma

$$\begin{aligned} \operatorname{tg}\theta_S &= -\frac{\operatorname{cth}\mu}{S\,\mu}\,\theta_S\,, \\ \operatorname{tg}\theta_A &= -\frac{\operatorname{th}\mu}{S\,\mu}\,\theta_A \end{aligned} \tag{1.254}$$

unde, generic,

$$\theta_{S,A} = S\,\mu\,\frac{k_{S,A}}{q_0}\,. \tag{1.255}$$

Pentru a ne face o idee despre valoarea *orientativă* a lui μ, putem încerca estimarea bazată pe $M = \frac{42}{17}\, m_H = 2,47\, m_H$ şi $d \approx z_0/2$. Astfel, din $\mu =$

$q_0 z_0/2$, rezultă

$$\mu = \frac{z_0}{\hbar}\left[\frac{21}{17} m_H V_0 \left(1 - \frac{E_0}{V_0}\right)\right]^{1/2} \approx 2,5\,. \tag{1.256}$$

Ceea ce este important, pentru această valoare, este faptul că $e^{2\mu} \approx e^5 \approx 150$ este cu mult mai mare decât 1. Deci, în ordinul zero, neglijând despicarea $\Delta E = E_A - E_S$, avem $\mathrm{cth}\mu = 1/\mathrm{th}\mu \approx 1$. În acest fel, pentru unghiul central θ_c, corespunzător lui E_0, avem o ecuaţie trigonometrică simplă,

$$\mathrm{tg}\,\theta_c = -\sqrt{\frac{E_0}{V_0 - E_0}}\,, \tag{1.257}$$

cu soluţia pe primul nivel E_0, n=1,

$$\theta_c = n\pi - \mathrm{arctg}\left[\frac{E_0}{V_0 - E_0}\right]^{1/2} \approx 2,4\,(rad)\,.$$

Introducând corecţiile $\varepsilon_{S,A}$ ale unghiului central θ_c, pentru fiecare din cele două niveluri, adică

$\theta_S = \theta_c - \varepsilon_S$, pentru nivelul E_S al stărilor simetrice,

$\theta_A = \theta_c + \varepsilon_A$, pentru nivelul E_A al stărilor antisimetrice,

şi dezvoltând, în ordinul I, tangentele din membrul stâng (în jurul lui θ_c), cele două ecuaţii, iniţial transcendente, capătă acum forma algebrică simplă

$$\begin{aligned}\left(\frac{1}{\cos^2\theta_c} + \frac{\mathrm{cth}\mu}{S\mu}\right)\varepsilon_S &= \frac{\mathrm{cth}\mu - 1}{S\mu}\,\theta_c \\ \left(\frac{1}{\cos^2\theta_c} + \frac{\mathrm{th}\mu}{S\mu}\right)\varepsilon_A &= \frac{1 - \mathrm{th}\mu}{S\mu}\,\theta_c\,.\end{aligned} \tag{1.258}$$

Deoarece

$$S\mu = \theta_c\left[\frac{V_0}{E_0} - 1\right]^{1/2} \approx 2,6\,,$$

iar

$$\frac{1}{\cos^2\theta_c} = \frac{V_0}{V_0 - E_0} \approx 1,8467\,,$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

cele două funcţii hiperbolice din stânga relaţiilor (1.258) ($\mathrm{cth}\mu = 1/\mathrm{th}\mu$) sunt comparate, practic, cu

$$S\mu \frac{V_0}{V_0 - E_0} \approx 4,8 ,$$

abaterea lor foarte mică faţă de 1 este aici complet neglijabilă. Nu acelaşi lucru se întâmplă în dreapta, unde compararea se face *prin substracţie* direct cu unitatea. Ca urmare, în ordinul I, putem scrie

$$\mathrm{cth}\mu \approx 1+\eta , \ \mathrm{th}\mu \approx 1-\eta , \ \text{cu} \ \mu = \frac{1}{2} \ln\left[\frac{2}{\eta}+1\right] , \ 0<\eta \ll 1 ,$$

astfel încât cele două corecţii unghiulare devin

$$\varepsilon_{S,A} = \eta\theta_c \left[S\mu \frac{V_0}{V_0 - E_0} + 1\right]^{-1} . \qquad (1.259)$$

Din relaţia generică de legătură unghi-energie, $\theta = S\mu[E/(V_0 - E)]^{1/2}$, având în vedere şi faptul că despicarea este foarte fină, deci $V_0 - E_{S,A} \approx V_0 - E_0$, rezultă pentru energiile celor două niveluri expresiile (evident, în ordinul I după ε):

$$E_{S,A} = E_0 \left[1 \mp 2\eta \left(S\mu \frac{V_0}{V_0 - E_0} + 1\right)^{-1}\right] . \qquad (1.260)$$

Acestea conduc la forma explicită a despicării energetice relative

$$\frac{\Delta E}{E_0} = \frac{E_A - E_S}{E_0} = 4\eta \left[S\mu \frac{V_0}{V_0 - E_0} + 1\right]^{-1} . \qquad (1.261)$$

Utilizând datele experimentale,

$$\frac{\Delta E}{E_0} = \frac{0,8}{950} = 8,42 \cdot 10^{-4} ,$$

obţinem $\eta \approx 1,22 \cdot 10^{-3}$ şi astfel, $\mu \approx 3,7$. Considerând, pentru masa de vibraţie, valoarea redusă

$$M = \frac{3m_H m_N}{3m_H + m_N} \approx 2,47\, m_H ,$$

rezultă

$$d = \mu q^{-1} = \frac{\mu\hbar}{\sqrt{2M(V_0 - E_0)}} = 0,2874\,\text{Å} .$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Din

$$S\mu = \left(\frac{\ell}{d} - 1\right)\mu \approx 2,6\,,$$

obţinem

$$\ell = \left(1 + \frac{26}{37}\right) d \approx 0,49\,\mathring{A}\,.$$

După cum putem observa, cele două distanţe îndeplinesc condiţiile de consistenţă $d < z_0$, $\ell > z_0$ şi, mai mult, calibrând *grosso modo* faţă de $z_0 = 0,4\,\mathring{A}$, rezultă $d \approx 0,3\,\mathring{A}$, $\ell \approx 0,5\,\mathring{A}$, adică, în acest model, molecula de amoniac este împachetată mai strâns decât ne-am fi aşteptat intuitiv, în *potenţialul trunchiat* $\{V_\alpha(z)\}_{\alpha=\overline{1,3}}$, deoarece $d/z_0 \approx 0,75$, $\ell/z_0 \approx 1,25$, în loc de 0,5 şi respectiv 2.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Capitolul 2

Formalismul matematic al Mecanicii Cuantice

În studiile avansate de Mecanică Cuantică, formalismul utilizat de aceasta presupune cunoaşterea amănunţită a unor rezultate şi metode din cadrul unor domenii importante ale Matematicii, cum ar fi: teoria grupurilor şi algebrelor, teoria măsurii, ecuaţii diferenţiale, teoria spaţiilor Hilbert, analiză funcţională, teoria fibratelor etc. Dat fiind scopul acestei lucrări, concepută ca un manual pentru cei ce doresc o introducere în Mecanica Cuantică, ne vom limita doar la o expunere succintă a bazelor formalismului acesteia. Pentru aprofundarea noţiunilor de *teoria spaţiilor Hilbert*, (spaţii liniare, produs scalar, spaţii Hilbert separabile), *spaţiul $\mathcal{L}^2$ al funcţiilor pătratic integrabile în sens Lebesgue, elemente de teoria operatorilor liniari în spaţii Hilbert, operatori autoadjuncţi asociaţi mărimilor fizice fundamentale* şi *proprietăţile acestora relative la ecuaţiile lor de vectori şi valori proprii*, recomandăm cititorilor interesaţi lucrarea [26].

2.1 Operatori în Mecanica Cuantică

În acelaşi an în care a dat ecuaţia care îi poartă numele, Schrödinger a observat o legătură formală între ecuaţiile (1.27) şi (1.28) şi expresia conservării energiei unei particule, din mecanica newtoniană.

Pentru a pune în evidenţă acest lucru, scriem ecuaţia Schrödinger (1.28)

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

sub forma

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\psi = E\psi \tag{2.1}$$

şi o comparăm cu legea conservării energiei:

$$\frac{p^2}{2m} + V = E. \tag{2.2}$$

Din (2.2) ar rezulta relaţia (2.1) dacă am pune

$$p^2 \to \hat{p}^2 = -\hbar^2\Delta \tag{2.3}$$

şi am aplica relaţia operaţională astfel obţinută asupra lui ψ. Am definit astfel *operatorul impuls*, pe care îl notăm cu $\hat{p}$ şi pe care îl asociem impulsului clasic prin

$$\vec{p} \to \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i}\nabla. \tag{2.4}$$

Comparând acum (2.2) cu ecuaţia Schrödinger dependentă de timp (1.30), pe care o scriem sub forma

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V\right)\Psi = \left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}\right)\Psi, \tag{2.5}$$

mai rezultă şi asocierea

$$E \to \hat{E} = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}, \tag{2.6}$$

prin care am introdus *operatorul energie*. Alegerea semnului s-a făcut în concordanţă cu funcţia de undă a particulei libere, pentru care rezultă

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad \hat{\vec{p}}\Psi = \vec{p}\Psi \\ &\text{b)}\quad \hat{E}\Psi = E\Psi. \end{aligned} \tag{2.7}$$

Considerând hamiltonianul ca un operator de forma

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V, \tag{2.8}$$

putem scrie ecuaţiile Schrödinger (1.27) şi (1.30) ca fiind

$$\hat{H}\psi = E\psi \tag{2.9}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi, respectiv,

$$\hat{H}\Psi = \hat{E}\Psi . \tag{2.10}$$

Ecuaţia (2.9) este ecuaţia valorilor proprii E şi a funcţiilor proprii ψ ale operatorului $\hat{H}$. Prin aceasta am delimitat spaţiul funcţiilor în care acţionează operatorii $\hat{\vec{p}}$ şi $\hat{H}$. În acest capitol, ne vom restrânge la *spaţiul Hilbert* al *funcţiilor pătratic integrabile*, notat cu $\mathcal{L}^2$, pentru care

$$\int \psi^* \psi \, d\tau \; < \; +\infty , \tag{2.11}$$

integrala extinzându-se la întregul spaţiu. În cele ce urmează, vom prezenta succint câteva elemente absolut necesare despre spaţii Hilbert şi operatori acţionând în aceste spaţii, recomandând totodată cititorului interesat câteva surse bibliografice, în care este realizată o tratare riguroasă a acestor noţiuni [26, 40].

Un *spaţiu Hilbert* este un spaţiu liniar, înzestrat cu un *produs scalar*

$$(\cdot\,,\,\cdot) : \mathcal{L}^2 \times \mathcal{L}^2 \to C , \tag{2.12}$$

normat cu norma indusă de (2.12),

$$\| \psi \| = (\psi\,,\,\psi)^{1/2} , \tag{2.13}$$

şi *complet* faţă de această normă (orice şir Cauchy este convergent). Produsul scalar (2.12) satisface axiomele:

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad (\psi\,,\,\psi) \geq 0 \;;\; (\psi\,,\,\psi) = 0 \;\Leftrightarrow\; \psi = 0 \\ &\text{b)} \quad (\varphi\,,\,\psi)^* = (\psi\,,\,\varphi) \\ &\text{c)} \quad (\varphi\,,\,\psi_1 + \psi_2) = (\varphi\,,\,\psi_1) + (\varphi\,,\,\psi_2) \\ &\text{d)} \quad (\varphi\,,\,c\psi) = c(\varphi\,,\,\psi) \;;\; c \in \mathbf{C} . \end{aligned} \tag{2.14}$$

Un *operator*, $\hat{A}$, este o aplicaţie

$$\hat{A} : \mathcal{L}^2 \to \mathcal{L}^2 , \tag{2.15}$$

şi, deoarece în întreg cursul de Mecanică Cuantică vom utiliza numai *operatori liniari*, acesta satisface relaţiile

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad \hat{A}(\varphi + \psi) = \hat{A}\varphi + \hat{A}\psi \\ &\text{b)} \quad \hat{A}(\lambda\varphi) = \lambda \hat{A}\varphi \;\;,\; \lambda \in \mathbf{C} . \end{aligned} \tag{2.16}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Operatorul adjunct (conjugat hermitic) al lui $\hat{A}$ este $\hat{A}^\dagger$, definit prin

$$(\varphi, \hat{A}^\dagger\psi) = (\hat{A}\varphi, \psi)\,, \ (\forall)\ \varphi, \psi \in \mathcal{L}^2\,, \tag{2.17}$$

iar operatorul $\hat{A}$ este *hermitic* dacă

$$\hat{A}^\dagger = \hat{A}\,, \tag{2.18}$$

respectiv

$$(\varphi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\varphi, \psi)\,. \tag{2.19}$$

Definind suma şi produsul operatorilor prin:

$$\begin{aligned} &\text{a)}\ \ (\hat{A}+\hat{B})\varphi = \hat{A}\varphi + \hat{B}\varphi \\ &\text{b)}\ \ (\hat{A}\hat{B})\varphi = \hat{A}(\hat{B}\varphi)\,, \end{aligned} \tag{2.20}$$

vom demonstra următoarele relaţii:

$$\begin{aligned} &\text{a)}\ \ (\hat{A}+\hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger \\ &\text{b)}\ \ (c\hat{A})^\dagger = c^*\hat{A}^\dagger \\ &\text{c)}\ \ (\hat{A}^\dagger)^\dagger = \hat{A} \\ &\text{d)}\ \ (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger\,. \end{aligned} \tag{2.21}$$

Demonstraţie

a) $(\varphi, (\hat{A}+\hat{B})^\dagger\psi) = ((\hat{A}+\hat{B})\varphi, \psi) = (\hat{A}\varphi, \psi) + (\hat{B}\varphi, \psi) =$
$= (\varphi, \hat{A}^\dagger\psi) + (\varphi, \hat{B}^\dagger\psi) = (\varphi, (\hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger)\psi)$

b) $\left(\varphi, (c\hat{A})^\dagger\psi\right) = (c\hat{A}\varphi, \psi) = c^*(\varphi, \hat{A}^\dagger\psi) = (\varphi, c^*\hat{A}^\dagger\psi)$

c) $(\varphi, (\hat{A}^\dagger)^\dagger\psi) = (\hat{A}^\dagger\varphi, \psi) = (\varphi, \hat{A}\psi)$

d) $(\varphi, (\hat{A}\hat{B})^\dagger\psi) = (\hat{A}\hat{B}\varphi, \psi) = (\hat{A}(\hat{B}\varphi), \psi) = (\hat{B}\varphi, \hat{A}^\dagger\psi) = (\varphi, \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger\psi)$.

q.e.d.

Teorema 1 *Dacă $\hat{A}$ şi $\hat{B}$ sunt operatori hermitici, suma lor va fi întotdeauna hermitică, iar produsul lor va fi hermitic dacă şi numai dacă operatorii comută ($\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$).*

BCU IAŞI / CONTRACT UNIVERSITY LIBRARY

Demonstraţie

Dacă

$$\hat{S} = \hat{A} + \hat{B}$$

şi

$$\hat{P} = \hat{A}\hat{B},$$

atunci avem

$$\hat{S}^\dagger = (\hat{A} + \hat{B})^\dagger = \hat{A}^\dagger + \hat{B}^\dagger = \hat{A} + \hat{B} = \hat{S}$$

şi

$$\hat{P}^\dagger = (\hat{A}\hat{B})^\dagger = \hat{B}^\dagger\hat{A}^\dagger = \hat{B}\hat{A}.$$

Hermiticitatea produsului, $\hat{P} = \hat{P}^\dagger$, implică

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A},$$

iar, la rândul ei, relaţia de comutare

$$\hat{A}\hat{B} = \hat{B}\hat{A}$$

implică hermiticitatea produsului, adică $\hat{P} = \hat{P}^\dagger$.

q.e.d.

Definiţia 1 *ψ este vector propriu al operatorului $\hat{A}$, aparţinând valorii proprii $A \in \mathbf{C}$, dacă*

$$\hat{A}\psi = A\psi, \tag{2.22}$$

aceasta fiind ecuaţia valorilor şi vectorilor proprii pentru operatorul $\hat{A}$.

Teorema 2 *Un operator hermitic are valori proprii reale.*

Demonstraţie

Dacă $\hat{A}$ este un operator hermitic, atunci este valabilă relaţia (2.19), scrisă sub forma

$$(\psi, \hat{A}\psi) = (\hat{A}\psi, \psi),$$

în care înlocuim ecuaţia de vectori şi valori proprii (2.22), adică

$$(\psi, A\psi) = (A\psi, \psi),$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi, aplicând proprietăţile (2.14.d, b), obţinem

$$A(\psi\,,\,\psi) = A^*(\psi\,,\,\psi)\,,$$

adică

$$A = A^*\,.$$

q.e.d.

Teorema 3 *Dacă ψ_1 şi ψ_2 sunt vectori proprii ai operatorului hermitic $\hat{A}$, aparţinând valorilor proprii A_1 şi A_2, cu $A_1 \neq A_2$, atunci ψ_1 şi ψ_2 sunt ortogonali, adică*

$$(\psi_1\,,\,\psi_2) = 0\,. \tag{2.23}$$

Demonstraţie

Aplicând definiţia (2.19), putem scrie

$$(\psi_1\,,\,\hat{A}\psi_2) = (\hat{A}\psi_1\,,\,\psi_2)$$

şi, cu ajutorul ecuaţiilor de vectori şi valori proprii pentru operatorul hermitic $\hat{A}$, obţinem

$$(\psi_1\,,\,A_2\psi_2) = (A_1\psi_1\,,\,\psi_2)\,,$$

de unde rezultă imediat relaţia

$$(A_2 - A_1)(\psi_1\,,\,\psi_2) = 0$$

care, pentru $A_1 \neq A_2$, implică

$$(\psi_1\,,\,\psi_2) = 0\,.$$

q.e.d.

În continuare, să revenim la cazul concret al operatorului impuls $\hat{\vec{p}}$ şi să demonstrăm hermiticitatea componentelor acestuia. Limitându-ne la spaţiul $\mathcal{L}^2$ al funcţiilor complexe de o variabilă reală, avem satisfăcută relaţia (2.19), adică

$$(\varphi\,,\,\hat{p}_x\psi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \varphi^* \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\psi}{\partial x}\,dx = \varphi^*\frac{\hbar}{i}\,\psi\Big|_{-\infty}^{+\infty} - \int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\varphi^*}{\partial x}\,\psi\,dx =$$

$$= \int_{-\infty}^{+\infty}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^*\psi\,dx = (\hat{p}_x\varphi\,,\,\psi)\,.$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Referitor la acest ultim calcul, se cuvine să facem două observaţii. În primul rând, observăm că operatorul diferenţial $\frac{d}{dx}$ nu este hermitic, unitatea imaginară i, prin proprietatea $i^* = -i$, conferindu-i proprietatea de hermiticitate. Cum $\hat{p}_x^2$, $\hat{p}_y^2$ şi $\hat{p}_z^2$ sunt operatori hermitici (deoarece $\hat{p}_x$ comută cu $\hat{p}_x$ etc.), rezultă, în baza teoremei 1, că şi suma

$$\hat{p}^2 = \hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2$$

este hermitică. În plus, funcţia reală $V(x, y, z)$ fiind, de asemenea, un operator hermitic, deoarece

$$(\varphi, V\psi) = (V\varphi, \psi),$$

putem afirma că orice hamiltonian de forma

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V$$

este un operator hermitic. După introducerea comutatorilor şi a proprietăţilor acestora, vom putea demonstra imediat că şi componentele $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$ ale momentului cinetic orbital $\hat{\vec{L}} = \vec{r} \times \hat{\vec{p}}$ sunt operatori hermitici.

În al doilea rând, când am demonstrat hermiticitatea operatorului $\hat{p}_x$ am presupus, tacit, că $\psi_1^* \psi_2|_{x \to \pm\infty} = 0$, ceea ce nu este de la sine înţeles, deoarece în $\mathcal{L}^2$, aşa cum vom vedea din exemplul următor, avem şi funcţii nemărginite la infinit. Într-adevăr, să considerăm în planul xoy graficul din figura 2.1 (vezi **Anexa B**) unde, pentru fiecare n, avem un triunghi isoscel cu aria 2^{-n}. Definim funcţia $\psi^2(x)$ ca fiind laturile acestor triunghiuri, exceptând bazele, iar în afara bazelor şi pentru $x < \frac{1}{2}$ avem că $\psi(x) = 0$. Atunci rezultă

$$\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 \, dx = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{2^n} = 1,$$

deci $\psi(x) \in \mathcal{L}^2$, dar ψ este nemărginit (deoarece $\psi(n) = 2^{n/2}$, care poate fi oricât de mare). În concluzie, vom considera că spaţiul funcţiilor de stare este, în principiu, $\mathcal{L}^2$, dar pentru fiecare problemă în parte trebuie să delimităm o anumită submulţime a lui $\mathcal{L}^2$, în care operaţiile pe care le efectuăm au sens. Astfel de delimitări apar prin intermediul ecuaţiei Schrödinger, deoarece funcţia de stare trebuie să fie derivabilă şi cu prima derivată continuă, adică $\psi \in C^1$.

Mărimile fizice care, în principiu, ar putea fi măsurate (de exemplu: coordonata, impulsul, energia, componentele momentului cinetic etc.) şi cărora le

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

ataşăm operatori hermitici le vom numi *observabile* (denumire dată atât mărimii fizice, cât şi operatorului corespunzător acesteia). *Dacă $\hat{A}$ este o observabilă, atunci ecuaţia*

$$\hat{A}\psi_i = A_i\psi_i\,, \tag{2.24}$$

cu condiţiile necesare impuse lui ψ_i, selectează singurele valori pe care le poate lua mărimea A în microcosmos.

2.2 Comutatori

În acest paragraf vom prezenta noţiunea de grup continuu, sau *grup Lie*, care ne va permite o introducere naturală a *comutatorului*, ca operaţie internă pe spaţiul liniar subîntins de generatorii *algebrei Lie* asociate acestuia.

2.2.1 Elemente de teoria grupurilor

Definiţia 2 *Un grup G este un set de elemente $\{a, b, \ldots\}$ cu o lege de compoziţie (multiplicare) $(a,b) : G\times G \to G$, notată cu $(a,b) = ab$, ce satisface următoarele proprietăţi:*

(i) Închidere. Dacă $a \in G$ şi $b \in G$, atunci şi $ab \in G$;

(ii) Asociativitate. Dacă $a \in G$, $b \in G$, $c \in G$, atunci $(ab)c = a(bc)$;

(iii) Existenţa elementului unitate. Există un element $e \in G$, numit element unitate, astfel încât $ea = ae = a$, pentru orice $a \in G$;

(iv) Existenţa elementului invers. Pentru orice $a \in G$, există $a^{-1} \in G$, numit element invers, astfel încât $a^{-1}a = aa^{-1} = e$.

Dacă, în plus, legea de multiplicare este *comutativă*, adică $ab = ba$, oricare ar fi $a, b \in G$, atunci G este un *grup abelian*. În continuare, vom prezenta succint (fără demonstraţie) următoarele propoziţii:

Propoziţia 1 *Pentru orice element $a \in G$, elementul invers, a^{-1}, este unic.*

Propoziţia 2 *Într-un grup G există un singur element neutru, e.*

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Ordinul unui grup G este numărul n de elemente din G. Pentru grupuri finite, n este un număr întreg pozitiv. Un *subgrup* este un subset de elemente din G care formează, de asemenea, grup. Un număr de elemente din G sunt *independente* dacă ele nu pot fi exprimate în funcţie de celelalte. Dacă orice element al grupului G poate fi exprimat în funcţie de o mulţime de elemente independente, atunci acestea reprezintă *generatorii grupului.* *Dimensiunea* unui grup este egală cu numărul generatorilor săi. Subgrupul H al lui G este *subgrup invariant* dacă, pentru orice element $t \in H$, ata^{-1} este un element al lui H, pentru toate elementele a din G. Un grup, G, care nu conţine nici un subgrup invariant, cu excepţia lui G şi a elementului unitate, se numeşte *grup simplu.* Un grup care are subgrupuri invariante proprii, dar nu are nici un subgrup invariant abelian, se numeşte *grup semisimplu.*

Definiţia 3 *O reprezentare este o corespondenţă între elementele $\{a_i\}$ ale unui grup abstract G şi un set de matrice $D(a_i)$, astfel încât:*

(i) dacă $a_1 a_2 = a$, atunci $D(a_1)D(a_2) = D(a)$;

(ii) $D(e) = I$, unde I este matricea unitate.

Din (i) şi (ii) rezultă imediat următoarea proprietate:

$$D(a^{-1}) = [D(a)]^{-1}. \tag{2.25}$$

Practic, diverse grupuri abstracte vor fi introduse prin intermediul reprezentărilor lor matriceale. Două reprezentări D şi D' ale aceluiaşi grup, G, sunt *echivalente* dacă există o matrice nesingulară, S, astfel încât să avem egalitatea

$$D(a) = S\,D'(a)\,S^{-1}\,,\ (\forall)\ a \in G\,. \tag{2.26}$$

Dacă reprezentarea $D(a)$ poate fi pusă, prin transformarea echivalentă (2.26), sub forma bloc-diagonală

$$\begin{pmatrix} D_1(a) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & D_2(a) & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & D_n(a) \end{pmatrix},\ (\forall)\ a \in G, \tag{2.27}$$

atunci $D(a)$ se numeşte *reprezentare reductibilă* şi se scrie ca o sumă directă $D_1(a) \oplus D_2(a) \oplus \dots \oplus D_n(a)$. Dacă reprezentarea $D(a)$ nu poate fi adusă la forma (2.27), atunci ea este *ireductibilă.*

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Un interes aparte pentru Mecanica Cuantică îl prezintă şi *reprezentările unitare*. Grupul matricelor care lasă invariant produsul scalar (x, y) poartă numele de grup al matricelor unitare şi se notează cu $U(n)$. Pentru $n > 1$, grupul este neabelian, iar elementele sale, notate cu U, vor fi matrice pătratice $n \times n$, cu proprietatea

$$UU^\dagger = U^\dagger U = I\,. \tag{2.28}$$

Dacă, în plus, matricele grupului au determinantul egal cu $+1$, grupul se numeşte *special unitar* şi se notează cu $SU(n)$. Asupra acestor grupuri, deosebit de importante pentru fizica particulelor elementare, vom reveni atât în subparagraful următor, cât şi în cadrul capitolului următor, dedicat teoriei momentelor cinetice. În încheiere, prezentă următoarea teoremă fără demonstraţie.

Teorema 4 *Orice reprezentare de matrice nesingulare, a unui grup finit G, poate fi transformată într-o reprezentare unitară, cu ajutorul unei transformări asemenea.*

2.2.2 Grupuri şi algebre Lie

Grupurile Lie prezintă o importanţă deosebită pentru fizica teoretică, în care un rol fundamental îl joacă conceptul de *simetrie*. În cele ce urmează, ne vom limita la cazul grupurilor *continue*, ale căror elemente se obţin prin variaţia continuă a unui număr finit de parametri reali independenţi.

Fie $a(\alpha) = a(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n)$ elementele grupului generat de parametrii infinitezimali $\{\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n\}$. Se consideră $e = a(0, 0 \ldots 0)$ ca element unitate al grupului, iar operaţia internă $a(\alpha)\, a(\beta) = a(\gamma)$ corespunde unei aplicaţii a spaţiului parametrilor în el însuşi,

$$f(\alpha, \beta) = \gamma\,, \tag{2.29}$$

ce satisface condiţiile

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad f(0, \alpha) = f(\alpha, 0) \\ &\text{b)} \quad f(\alpha, f(\beta, \gamma)) = f(f(\alpha, \beta), \gamma)\,. \end{aligned} \tag{2.30}$$

În cazul grupurilor Lie, f este o funcţie continuă, diferenţiabilă în raport cu variabilele sale, deci se pot folosi metodele analitice în spaţiul abstract al acestor grupuri. Din punct de vedere al Mecanicii Cuantice, fiind interesaţi de

reprezentările unitare ale grupurilor Lie, scriem elementele grupului sub forma [14]

$$a(\alpha) = \exp\left\{i\,\alpha^j X_j\right\}\ ,\ \ j = \overline{1,\,n}\,, \tag{2.31}$$

de unde, printr-o dezvoltare în serie în vecinătatea unităţii, $e = 1$, şi neglijarea puterilor superioare ale parametrilor esenţiali, obţinem, din

$$a(\alpha) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{i^n}{n!}\, \alpha^{j_1} X_{j_1}\, \alpha^{j_2} X_{j_2} \ldots \alpha^{j_n} X_{j_n}\,,$$

expresia

$$a(\alpha) = 1 + i\alpha^j X_j + \ldots \tag{2.32}$$

Mărimile

$$X_j = -\,i\,\frac{\partial a}{\partial \alpha^j}\bigg|_{\alpha=0}\,, \tag{2.33}$$

în număr egal cu numărul parametrilor esenţiali şi definite în elementul unitate $e = a(0)$, poartă numele de *generatorii infinitezimali ai grupului*. A construi o *reprezentare* oarecare *a grupului* înseamnă să asociem elementelor a, matricele $D(a)$, satisfăcând proprietăţile din definiţia 3. Astfel, relaţia (2.31) devine

$$D(a) = \exp\left\{i\alpha^j T_j\right\}\ ,\ \ j = \overline{1,\,n}\,, \tag{2.34}$$

unde $T_j \equiv T(X_j)$ sunt n matrice hermitice, de dimensiune $m \times m$, ce formează o *reprezentare a generatorilor* infinitezimali ai grupului. Practic, trecerea de la matricele reprezentării grupului la o reprezentarea a generatorilor săi se face prin aplicaţia exponenţială (2.34). În particular, cele două reprezentări pot avea aceeaşi dimensiune. Mărimile $\{T_j\}_{j=\overline{1,n}}$ generează un spaţiu liniar $n-$dimensional, notat cu $\mathcal{G}$, în care vom pune în evidenţă o nouă operaţie internă. Pentru aceasta, utilizând (2.32), calculăm compunerea

$$D(a(\alpha))\,D(a(\beta))\,D(a(\alpha))^{-1}\,D(a(\beta))^{-1} = e + \alpha^i\beta^j\,(T_iT_j - T_jT_i) + \ldots \tag{2.35}$$

care trebuie să fie, de asemenea, un element al lui G, adică să fie de forma (2.32), în reprezentarea (2.34). Astfel, $T_iT_j - T_jT_i$ este un element din $\mathcal{G}$, adică se exprimă ca o combinaţie liniară a generatorilor acestui spaţiu liniar,

$$T_i\,T_j - T_j\,T_i = i\,C_{ij}^s\,T_s\,. \tag{2.36}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Prin definiţie, se numeşte *comutatorul* elementelor T_i, T_j, din spaţiul liniar $\mathcal{G}$, elementul

$$[T_i\,,\,T_j] = T_iT_j - T_jT_i\,. \tag{2.37}$$

Scriind relaţia (2.36) sub forma

$$[T_i\,,\,T_j] = i\,C_{ij}^s\,T_s\,, \tag{2.38}$$

am pus în evidenţă o nouă lege de compoziţie internă în spaţiul liniar în $\mathcal{G}$, numită comutator.

Definiţia 4 *Un spaţiu liniar $\mathcal{L}$ se numeşte algebră liniară dacă este înzentrat, pe lângă adunare, cu încă o operaţie internă, notată cu $\circ$, care este distributivă la stânga şi la dreapta faţă de adunare, adică*

$$\begin{aligned} X\circ(Y+Z) &= X\circ Y + X\circ Z \\ (X+Y)\circ Z &= X\circ Z + Y\circ Z\,,\ (\forall)\,X,\,Y,\,Z\in\mathcal{L}\,. \end{aligned} \tag{2.39}$$

Algebrele liniare pot fi atât asociative, cât şi neasociative. Un exemplu de algebră Lie neasociativă este următorul.

Definiţia 5 *Algebra $\mathcal{L}$, în care operaţia internă $\circ$ satisface axiomele:*

$$\begin{aligned} &(i)\quad X\circ X = 0\,,\ (\forall)\,X\in\mathcal{L} \\ &(ii)\quad X\circ(Y\circ Z) + Z\circ(X\circ Y) + Y\circ(Z\circ X) = 0\,, \end{aligned} \tag{2.40}$$

se numeşte algebră Lie.

Teorema 5 *Într-o algebră Lie este satisfăcută relaţia*

$$X\circ Y = -Y\circ X\,,\ (\forall)\,X,\,Y\in\mathcal{L}\,. \tag{2.41}$$

Demonstraţia rezultă imediat, având în vedere proprietăţile (2.39) şi axioma (ii) din definiţia 5.

Teorema 6 *Dacă în algebra liniară $\mathcal{L}$ operaţia $\circ$ se înlocuieşte cu comutatorul, se obţine o algebră Lie.*

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Demonstraţia este imediată, deoarece comutatorul, introdus prin (2.37), satisface axiomele definiţiei 5.

Din cele prezentate până acum, rezultă că spaţiul liniar $\mathcal{G}$, în care am definit comutatorul (2.38), este o algebră Lie, denumită *algebra Lie asociată grupului Lie G*. Reprezentările unitare ale acestei algebre sunt deosebit de importante pentru studiul sistematicii particulelor elementare şi a interacţiunilor dintre acestea. Datorită corespondenţei biunivoce dintre grupurile Lie conexe şi algebrele Lie asociate lor, putem trece imediat de la reprezentările unora la reprezentările celorlalte. Astfel, observăm că aplicaţia exponenţială (2.34) face, practic, trecerea de la elementul grupului $a \in G$, într-o reprezentare $D(a)$, la elementul $X = \alpha^j X_j$, aparţinând algebrei $\mathcal{G}$, căruia, în reprezentarea $T(X)$, îi asociem generatorii $T_j = T(X_j)$, satisfăcând axioma (2.40.(*ii*)), denumită şi *identitatea Jacobi*, adică

$$[T_i, [T_j, T_m]] + [T_m, [T_i, T_j]] + [T_j, [T_m, T_i]] = 0. \tag{2.42}$$

În sfârşit, din (2.37) şi (2.38) rezultă că numerele reale $\left\{C_{ij}^s\right\}$ din relaţia (2.36), ce poartă numele de *constante de structură*, au proprietatea

$$C_{ij}^s = -C_{ji}^s. \tag{2.43}$$

2.2.3 Proprietăţile comutatorilor

În acest subparagraf, vom prezenta unele proprietăţi ale comutatorilor operatorilor, relative la ecuaţiile de funcţii şi valori proprii ale acestora [30].

Teorema 7 *Comutatorii satisfac următoarele relaţii:*

$$\begin{aligned}
&\text{a)} \quad \left[\hat{A}, \hat{B}\right] = -\left[\hat{B}, \hat{A}\right] \\
&\text{b)} \quad \left[\hat{A}, \hat{B}+\hat{C}\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right] \\
&\text{c)} \quad \left[\hat{A}+\hat{B}, \hat{C}\right] = \left[\hat{A}, \hat{C}\right] + \left[\hat{B}, \hat{C}\right] \\
&\text{d)} \quad \left[\hat{A}, \hat{B}\hat{C}\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{C} + \hat{B}\left[\hat{A}, \hat{C}\right] \\
&\text{e)} \quad \left[\hat{A}\hat{B}, \hat{C}\right] = \hat{A}\left[\hat{B}, \hat{C}\right] + \left[\hat{A}, \hat{C}\right]\hat{B} \\
&\text{f)} \quad \left[\hat{A}, \hat{B}^n\right] = n\left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{B}^{n-1}, \text{pentru } \left[\left[\hat{A}, \hat{B}\right], \hat{B}\right] = 0, \\
&\text{g)} \quad [A, [B, C]] + [C, [A, B]] + [B, [C, A]] = 0.
\end{aligned} \tag{2.44}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Demonstraţie

Relaţiile a) şi b), c) coincid, respectiv, cu (2.41) şi (2.39). Relaţiile d) şi e) se verifică imediat, deoarece

$$\hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{B}\hat{C}\hat{A} = (\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\hat{C} + \hat{B}(\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A})$$

şi, respectiv,

$$\hat{A}\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{A}\hat{B} = \hat{A}(\hat{B}\hat{C} - \hat{C}\hat{B}) + (\hat{A}\hat{C} - \hat{C}\hat{A})\hat{B}\,.$$

În cazul f), vom aplica metoda inducţiei. Astfel, pentru $n = 2$, obţinem relaţia d), în care $\hat{B} = \hat{C}$. Presupunând f) adevărată pentru n, trecem la $n+1$ şi, utilizând d), obţinem

$$\left[\hat{A}, \hat{B}^{n+1}\right] = \left[\hat{A}, \hat{B}^n\right]\hat{B} + \hat{B}^n\left[\hat{A}, \hat{B}\right] =$$
$$= n\left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{B}^n + \hat{B}^n\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = (n+1)\left[\hat{A}, \hat{B}\right]\hat{B}^n\,.$$

q.e.d.

Teorema 8 *Dacă elementele şirului total*[1] $\{\chi_i\}$, *din spaţiul Hilbert* $\mathcal{L}^2$, *sunt vectori proprii atât ai operatorului* $\hat{A}$, *cât şi ai lui* $\hat{B}$, *atunci* $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$.

Demonstraţie

Alegând şirul $\{\chi_i\}$ ca bază în spaţiul Hilbert E, putem scrie orice $\psi \in E$ sub forma

$$\psi = \sum_i c_i \chi_i\,. \tag{2.45}$$

Dar, prin ipoteză, avem ecuaţiile de vectori şi valori proprii

$$\hat{A}\chi_i = a_i \chi_i \;\;;\;\; \hat{B}\chi_i = b_i \chi_i$$

care ne permit să calculăm expresiile

$$\hat{A}\hat{B}\psi = \hat{A}\hat{B}\sum_i c_i\chi_i = \sum_i c_i \hat{A}\left(\hat{B}\chi_i\right) = \sum_i c_i b_i \left(\hat{A}\chi_i\right) = \sum_i c_i\, b_i\, a_i\, \chi_i\,;$$
$$\hat{B}\hat{A}\psi = \sum_i c_i\, a_i\, b_i\, \chi_i\,.$$

[1] O mulţime Z de elemente ortonormale, dintr-un spaţiu Hilbert, se numeşte totală, dacă $\{(x,z) = 0\,;\; (\forall)\, z \in Z\} \Rightarrow x = 0$.

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Atunci, pentru orice $\psi \in E$, avem

$$(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A})\psi = 0\,,$$

adică

$$\left[\hat{A}\,,\,\hat{B}\right] = 0\,.$$

q.e.d.

În continuare, enunţăm câteva teoreme ale căror demonstraţii sunt prezentate în lucrările [26], pe care le recomandăm cititorului interesat.

Teorema 9 *Fie $\hat{A}$ şi $\hat{B}$ doi operatori autoadjuncţi şi complet continui, comutativi, fiecare având vectori proprii care formează şiruri totale. Atunci se poate găsi un şir total $\{\psi_i\}$ ale cărui elemente sunt vectori proprii comuni operatorilor $\hat{A}$ şi $\hat{B}$.*

Teorema 10 *Dacă $\hat{A}^\dagger = \hat{A}$ şi $\hat{B}^\dagger = \hat{B}$ şi $\left[\hat{A}\,,\,\hat{B}\right] \neq 0$, atunci operatorii $\hat{A}$ şi $\hat{B}$ nu pot avea un set total de funcţii proprii.*

În încheierea acestei secţiuni, dedicată proprietăţilor comutatorilor, vom prezenta relaţiile de comutare satisfăcute de operatorii coordonată $\hat{q}^a$ şi impuls $\hat{p}_b$, introduşi prin (2.4). O primă proprietate, deosebit de importantă, este accea că *toţi operatorii coordonată comută între ei* şi *toţi operatorii impuls comută între ei*, adică

$$\begin{aligned} \left[\hat{q}^a\,,\,\hat{q}^b\right] &= 0 \\ [\hat{p}_a\,,\,\hat{p}_b] &= 0\,,\quad a,b = 1,\ldots,f\,. \end{aligned} \tag{2.46}$$

Pe de altă parte, *operatorul coordonată a unei particule comută cu orice operator impuls al acesteia, cu excepţia celui aparţinând aceleiaşi componente.* Această proprietate poate fi verificată imediat deoarece, pentru orice funcţie diferenţiabilă ψ, avem

$$\begin{aligned} &q^a\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q^a}\right)\psi(q^1,\ldots,q^a,\ldots,q^f) - \\ &-\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial q^a}\right)\left(q^a\,\psi(q^1,\ldots,q^a,\ldots,q^f)\right) = -\frac{\hbar}{i}\,\psi(q^1,\ldots,q^a,\ldots,q^f)\,. \end{aligned}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

În concluzie, operatorii coordonată şi impuls satisfac următoarele relaţii de comutare:

$$[\hat{q}^a\,,\,\hat{p}_b]\,\psi = -\frac{\hbar}{i}\,\delta^a_b\,\psi\,, \tag{2.47}$$

numite *relaţii de comutare canonice* şi care pot fi scrise, în mod simbolic, sub forma

$$[\hat{q}^a\,,\,\hat{p}_b] = -\frac{\hbar}{i}\,\delta^a_b\,. \tag{2.48}$$

Perechile $\{\hat{q}^a\,,\,\hat{p}_a\}$ sunt numite *canonic conjugate*, la fel ca analoagele lor din Mecanica Analitică.

Dacă $\hat{Q}$ şi $\hat{P}$ formează o pereche canonic conjugată, atunci, înlocuind comutatorul (2.47) în (2.44.f), obţinem relaţia

$$\left[\hat{Q}\,,\,\hat{P}^n\right] = -\frac{\hbar}{i}\,n\,\hat{P}^{n-1} \tag{2.49}$$

care, utilizată în dezvoltarea în serie a lui $e^{i\alpha\hat{P}}$, ne conduce la comutatorul

$$\left[\hat{Q}\,,\,e^{i\alpha\hat{P}}\right] = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(i\alpha)^n}{n!}\left[\hat{Q}\,,\,\hat{P}^n\right] = -\hbar\,\alpha\,e^{i\alpha\hat{P}}\,. \tag{2.50}$$

Procedând în mod analog pentru dezvoltarea în serie a expresiei $e^{i\beta\hat{Q}}$, vom obţine *relaţia lui Weyl*, adică

$$e^{i\beta\hat{Q}}e^{i\alpha\hat{P}} = e^{-i\hbar\alpha\beta}e^{i\alpha\hat{P}}e^{i\beta\hat{Q}}\,,\ \alpha,\,\beta\in\mathbf{R}\,, \tag{2.51}$$

care, pentru operatori mărginiţi pe întreg spaţiul Hilbert, înlocuieşte relaţia de comutare canonică $\left[\hat{Q}\,,\,\hat{P}\right] = -\frac{\hbar}{i}$.

În sfârşit, în contextul celor discutate în subparagraful anterior, să observăm că familia de operatori unitari

$$U_\alpha = e^{i\alpha\hat{A}}\,,\ \alpha\in\mathbf{R}\,, \tag{2.52}$$

satisfăcând proprietăţile

$$\begin{aligned} U_0 &= 1\\ U_\alpha^{-1} &= U_{-\alpha}\\ U_\alpha U_\beta &= U_\beta U_\alpha\,, \end{aligned}$$

formează un grup abelian, ale cărui elemente se obţin prin variaţia continuă a parametrului α. Enunţăm, fără demonstraţie, următoarea teoremă.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Teorema 11 *Fiecărei familii continue şi uniparametrice, U_α, $\alpha \in \mathbf{R}$, de operatori unitari pe spaţiul Hilbert, satisfăcând relaţia*

$$U(\alpha+\beta) = U(\alpha)U(\beta)\,, \tag{2.53}$$

îi corespunde un operator hermitic unic $\hat{A}$, astfel încât

$$U(\alpha) = e^{i\alpha\hat{A}}\,, \tag{2.54}$$

pentru orice $\alpha \in \mathbf{R}$.

Observăm că familia de operatori din (2.52), satisfăcând axiomele din definiţia 3 (vezi paragraful 2.2.1), formează o reprezentare a unui grup Lie uniparametric, $\hat{A}$ fiind operatorul hermitic corespunzător generatorului algebrei Lie asociate.

2.3 Formalismul Dirac

2.3.1 Vectori de stare

Starea unei microparticule este dată de o funcţie ψ, cu proprietatea

$$(\psi\,,\,\psi) = 1\,, \tag{2.55}$$

care se numeşte *funcţie de stare* sau *vector de stare*. Funcţia ψ a fost selectată din $\mathcal{L}^2$, printr-un procedeu fizic pe care îl vom descrie în continuare.

Fie $\hat{A}$ o observabilă cu un set total de funcţii proprii în $\mathcal{L}^2$. Presupunând realizat procedeul de ortonormare al lui Schmidt [40], avem

$$\hat{A}\psi_i = A_i\psi_i \;;\; (\psi_i\,,\,\psi_k) = \delta_{ik}\,, \tag{2.56}$$

ceea ce ne permite să alegem şirul $\{\psi_i\}$ ca o bază în $\mathcal{L}^2$. Atunci, vectorul $\psi \in \mathcal{L}^2$ poate fi scris ca o combinaţie liniară de tipul

$$\psi = \sum_i c_i\,\psi_i\,, \tag{2.57}$$

cu

$$c_i = (\psi_i\,,\,\psi)\,. \tag{2.58}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Evident, deoarece $\| c_i \psi_i \| = |c_i| \, \| \psi_i \| = |c_i|$, tragem concluzia că c_i ne arată cu ce pondere contribuie ψ_i la realizarea stării ψ (fiindcă $(\psi_i , \psi_i) = 1$). Din (2.55) şi (2.57), mai rezultă relaţia

$$1 = (\psi , \psi) = \left(\sum_i c_i \psi_i , \sum_k c_k \psi_k \right) = \sum_{i,k} c_i^* \, c_k \, (\psi_i , \psi_k) ,$$

care, datorită lui (2.56), ne conduce la rezultatul

$$\sum_i |c_i|^2 = 1 , \tag{2.59}$$

a cărui interpretare este următoarea: $|c_i|^2$ este probabilitatea ca, fiind în starea ψ, la o testare a observabilei $\hat{A}$, să ne găsim chiar în cazul valorii proprii A_i.

Dacă numărul total de determinări este n şi n_i este numărul cazurilor când $\hat{A}$ are valoarea proprie A_i, atunci putem scrie

$$\lim_{n \to \infty} \frac{n_i}{n} = |c_i|^2 , \tag{2.60}$$

ceea ce ne arată faptul că funcţia ψ, prin dezvoltarea (2.57), ne dă o analiză referitoare la manifestarea observabilei $\hat{A}$ în această stare.

2.3.2 Vectori *bra* şi *ket*

În 1928, pentru a conferi o supleţe matematică mai pronunţată formalismului dezvoltat de Schrödinger, P.A.M. Dirac efectuează o generalizare a acestuia, elaborând formalismul *bra-ket*.

Stările cuantice ale unui sistem fizic sunt reprezentate prin *vectori de stare*, elemente ale *spaţiului abstract al stărilor* $\mathcal{H}$, numiţi *vectori ket* (sau, pe scurt, *ket*) şi notaţi cu simbolul $|\rangle$ în interiorul căruia se scrie o etichetă (litere sau cifre), ce distinge vectorii între ei.

De exemplu, funcţiei de undă ψ_n, soluţie a ecuaţiei Schrödinger, îi vom asocia vectorul *ket* $|\psi_n\rangle$ sau, simplu, $|n\rangle$, prin

$$\psi_n \in \mathcal{L}^2(\mathbf{R}) \; \rightarrow \; |\psi_n\rangle \equiv |n\rangle \in \mathcal{H}(\mathbf{R}) . \tag{2.61}$$

Dacă spaţiile $\mathcal{L}^2(\mathbf{R})$ şi $\mathcal{H}(\mathbf{R})$ sunt izomorfe, putem transfera regulile de calcul vectorial din $\mathcal{L}^2$ în $\mathcal{H}$. Ulterior, vom renunţa la obligativitatea acestui izomorfism.

BUCHAREST UNIVERSITY LIBRARY

Spaţiul liniar dual al lui $\mathcal{H}$, notat cu $\mathcal{H}^*$, va avea drept elemente aşa-numiţii *vectori bra* (sau, pe scurt, *bra*), notaţi cu simbolul $\langle|$, în interiorul căruia se scrie eticheta ce distinge vectorii între ei. Evident, în cazul exemplului precedent, analogia va fi

$$\psi_n^* \in \mathcal{L}^2(\mathbf{R}) \rightarrow \langle\psi_n| \equiv \langle n| \in \mathcal{H}^*(\mathbf{R}). \tag{2.62}$$

Un vector *bra* reprezintă *funcţionala liniară* definită pe vectorii $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, adică operaţia liniară care asociază fiecărui *ket*, $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, un număr complex, $\varphi(|\psi\rangle)$, pe care îl vom nota cu

$$\varphi(|\psi\rangle) = \langle\varphi|\psi\rangle, \tag{2.63}$$

liniaritatea fiind exprimată prin

$$\langle\varphi|\,(a_1\psi_1 + a_2\psi_2)\rangle = a_1\langle\varphi|\psi_1\rangle + a_2\langle\varphi|\psi_2\rangle. \tag{2.64}$$

Mulţimea acestor funcţionale liniare formează spaţiul liniar $\mathcal{H}^*$, numit spaţiul dual al lui $\mathcal{H}$.

Evident, vectorului *ket*

$$|\chi\rangle = \lambda|\psi\rangle \tag{2.65}$$

îi va corespunde vectorul *bra*

$$\langle\chi| = \lambda^*\langle\psi|. \tag{2.66}$$

Dacă scriem unul după altul un *bra* şi un *ket*, renunţând la dublarea liniei din mijloc, vom subînţelege că este vorba de produsul scalar al acestora, adică

$$\langle\chi|\psi\rangle = (\chi, \psi), \tag{2.67}$$

în sensul contracţiei uzuale [40] a bazei duale, $\{\langle i|\}$ (pe $\mathcal{H}^*$), cu baza propriu-zisă, $\{|k\rangle\}$ (pe $\mathcal{H}$), dată prin relaţia de definiţie

$$\langle i|k\rangle = \delta_{ik}.$$

Acum, putem explica provenienţa denumirilor de *bra* şi *ket*. Fiecare semn, $\langle|$ sau $|\rangle$, constituie o jumătate de paranteză din produsul scalar şi, cum în limba engleză *bracket* înseamnă paranteză, tăietura acestui cuvânt, adică *bra-c-ket* (cu omiterea *c*-ului), ne conduce la denumirile date de Dirac.

Scriind vectorii în ordine inversă, adică mai întâi un *ket* şi apoi un *bra*, vom obţine un operator, $\hat{F}$, definit prin

$$\hat{F} = |\psi\rangle\langle\chi|. \tag{2.68}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Acest operator aplică orice *ket*, $|\varphi\rangle$, într-un *ket* proporţional cu $|\psi\rangle$, deoarece

$$\hat{F}|\varphi\rangle = |\psi\rangle\langle\chi|\varphi\rangle\,, \tag{2.69}$$

şi orice *bra*, $\langle\varphi|$, într-un *bra* proporţional cu $\langle\chi|$, în sensul relaţiei

$$\langle\varphi|\hat{F} = \langle\varphi|\psi\rangle\langle\chi|\,. \tag{2.70}$$

În continuare, utilizând formalismul descris până acum, vom transcrie o parte dintre relaţiile prezentate în cadrul acestui paragraf. Astfel, (2.57) şi (2.58) devin

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i|i\rangle\,, \tag{2.71}$$

respectiv

$$c_i = \langle i|\psi\rangle\,, \tag{2.72}$$

unde am convenit să utilizăm notaţiile:

$$|\psi_i\rangle \equiv |i\rangle \;\;;\;\; \langle\psi_i| \equiv \langle i|\,, \tag{2.73}$$

cu $|1\rangle, |2\rangle, \ldots, |i\rangle, \ldots$ o bază în spaţiul vectorilor de stare. Înlocuind relaţia (2.72) în (2.71), aceasta din urmă capătă forma

$$|\psi\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|\psi\rangle\,, \tag{2.74}$$

punând în evidenţă *operatorul identitate*:

$$\hat{I} = \sum_i |i\rangle\langle i|\,. \tag{2.75}$$

Acesta poate acţiona atât asupra unui vector *ket*, ca în (2.74), cât şi la stânga unui vector *bra*, adică

$$\langle\psi| = \langle\psi|\hat{I} = \sum_i \langle\psi|i\rangle\langle i|\,, \tag{2.76}$$

relaţia (2.76) nefiind altceva decât conjugata complexă a relaţiei (2.74). Mai adăugăm faptul că şirul $\{\langle i|\}$ este baza duală a lui $\{|i\rangle\}$, relaţia (2.75) fiind adevărată numai atunci când suma se extinde asupra întregii baze.

SCUIAU / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Prin acţiunea unui operator asupra unui *ket* se obţine un alt *ket*, adică

$$\hat{A}|\psi\rangle = |\varphi\rangle\,, \tag{2.77}$$

de unde, prin impunerea relaţiei

$$\langle\chi|(\hat{A}|\psi\rangle) = (\langle\chi|\hat{A})|\psi\rangle\,, \tag{2.78}$$

definim acţiunea operatorului $\hat{A}$ la stânga asupra unui *bra*. Într-adevăr, cunoscând pe $\hat{A}|i\rangle$, $(i = 1, 2, \ldots)$, coeficienţii

$$d_i^* = \langle\chi|(\hat{A}|i\rangle) \tag{2.79}$$

sunt determinaţi, aceştia fiind (conform relaţiei (2.78)) chiar componentele vectorului *bra*

$$\langle\varphi| = \langle\chi|\hat{A}\,. \tag{2.80}$$

Relaţia (2.78) poate fi justificată imediat, deoarece

$$\langle\varphi| = \sum_i \langle\varphi|i\rangle\langle i| = \sum_i (\langle\chi|\hat{A})|i\rangle\langle i| = \sum_i \langle\chi|(\hat{A}|i\rangle)\langle i| = \sum_i d_i^*\langle i|$$

şi, utilizarea parantezelor fiind inutilă, ambii membri ai lui (2.78) capătă forma

$$\langle\chi|(\hat{A}|\psi\rangle) = (\langle\chi|\hat{A})|\psi\rangle = \langle\chi|\hat{A}|\psi\rangle\,, \tag{2.81}$$

în care operatorul $\hat{A}$ poate acţiona sau la dreapta, sau la stânga. Aceasta ne obligă să scriem condiţia ca $\hat{A}^\dagger$ să fie operatorul adjunct lui $\hat{A}$ sub forma

$$\langle\chi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{A}|\chi\rangle^*\,, \tag{2.82}$$

de unde, introducând vectorul

$$\hat{A}|\chi\rangle = |\varphi\rangle\,, \tag{2.83}$$

avem relaţia

$$\langle\chi|\hat{A}^\dagger|\psi\rangle = \langle\psi|\varphi\rangle^* = \langle\varphi|\psi\rangle\,. \tag{2.84}$$

Deoarece (2.84) trebuie să fie adevărată pentru orice *ket*, $|\psi\rangle$, rezultă adjuncta relaţiei (2.83), adică

$$\langle\chi|\hat{A}^\dagger = \langle\varphi|\,, \tag{2.85}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

justificând astfel şi următoarea conjugare hermitică

$$|\varphi\rangle^\dagger = \langle\varphi| \,. \tag{2.86}$$

Din cele prezentate până acum, putem desprinde următoarea **regulă practică:** In notaţiile lui Dirac, conjugata hermitică a unei expresii se obţine înlocuind fiecare vector *ket* cu dualul său, vectorii *bra* cu vectorii duali corespunzători, operatorii cu adjuncţii lor, constantele cu conjugatele complexe şi schimbând ordinea factorilor în produs. De exemplu, conjugatul hermitic al expresiei $a|\psi\rangle\langle\xi|\hat{A}|\eta\rangle$ este

$$\left(a|\psi\rangle\langle\xi|\hat{A}|\eta\rangle\right)^\dagger = a^*\langle\eta|\hat{A}^\dagger|\xi\rangle\langle\psi| \,.$$

Pentru sistematizarea ideilor, în încheierea acestui subparagraf, vom enunţa axiomele care stau la baza formalismului *bra-ket*, fără a pretinde completitudinea lor.

A1 Vectorii de stare formează un spaţiu liniar abstract, $\mathcal{H}$, ale cărui elemente se numesc vectori *ket* şi se notează cu $|\rangle$ (spaţiul liniar $\mathcal{L}^2$ fiind doar o realizare particulară a lui $\mathcal{H}$).

A2 Asociem fiecărui *ket* un obiect nou, numit *bra*, notat cu $\langle|$, având următoarele proprietăţi:

1. dacă unui vector *ket*, $|\psi\rangle$, îi corespunde un vector *bra*, $\langle\psi|$, atunci lui $|\psi\rangle + |\varphi\rangle$ îi va corespunde $\langle\psi| + \langle\varphi|$;
2. vectorului *ket* $a\,|\psi\rangle$ îi corespunde vectorul *bra* $a^*\langle\psi|$.

Vectorii *bra* formează un spaţiu liniar complex, $\mathcal{H}^*$, numit *dualul* lui $\mathcal{H}$.

A3 Oricărei perechi de vectori $\langle\varphi|$ şi $|\psi\rangle$ îi corespunde un număr complex egal cu produsul scalar al celor doi vectori şi notat cu $\langle\varphi|\psi\rangle$, deci $\langle\varphi|\psi\rangle$ satisface axiomele produsului scalar.

A4 Impunem ca, faţă de norma indusă de acest produs scalar, spaţiul să fie complet, astfel ca $\mathcal{H}$ să fie spaţiu Hilbert.

A5 Dacă $\hat{A}$ este un operator liniar ce acţionează pe $\mathcal{H}$, el acţionează şi în $\mathcal{H}^*$, conform relaţiei (2.81). Operatorul $\hat{A}^\dagger$, adjunct operatorului $\hat{A}$, se defineşte prin (2.82), iar $\hat{A}$ este hermitic dacă $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$.

FCUAIC CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

2.4 Valoarea medie a unei observabile

2.4.1 Definiţia valorii medii

Definiţia 6 *Valoarea medie, $\langle A \rangle$, a observabilei $\hat{A}$ în starea $|\psi\rangle$ este definită prin*

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle . \tag{2.87}$$

Pentru a justifica această definiţie, să presupunem că vectorii proprii ai lui $\hat{A}$ formează un set total, $\{|i\rangle\}$, deci avem

$$\hat{A}|i\rangle = A_i |i\rangle .$$

Conform ipotezei, putem utiliza relaţiile (2.71), (2.72) şi, ţinând cont de semnificaţia dată lui $|c_i|^2$, avem, pe rând,

$$\langle A \rangle = \sum_i |c_i|^2 A_i = \sum_i c_i^* c_i A_i = \sum_i \langle \psi | i \rangle c_i A_i =$$

$$= \sum_i \langle \psi | A_i | i \rangle c_i = \sum_i \langle \psi | \hat{A} | i \rangle c_i = \langle \psi | \hat{A} \left(\sum_i c_i | i \rangle \right) .$$

Deoarece $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, rezultă că putem scrie următoarea relaţie:

$$\langle A \rangle^* = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle^* = \langle \psi | \hat{A}^\dagger | \psi \rangle = \langle \psi | A | \psi \rangle = \langle A \rangle \tag{2.88}$$

care pune în evidenţă faptul că *valoarea medie a unei observabile este întotdeauna reală.*

2.4.2 Variaţia în timp a valorii medii

Unul dintre principiile Mecanicii Cuantice presupune că variaţia în timp a vectorilor de stare $|\psi\rangle$ trebuie să satisfacă ecuaţia lui Schrödinger dependentă de timp, (2.10), adică, ţinând cont de (2.6),

$$\hat{H}|\psi\rangle = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle . \tag{2.89}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Cu această accepţiune, din definiţia valorii medii, avem

$$\frac{d}{dt}\langle A\rangle = \frac{d}{dt}\left(\langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle\right) =$$
$$= \left(\frac{\partial}{\partial t}\langle\psi|\right)\hat{A}|\psi\rangle + \langle\psi\left|\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\right|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{A}\left(\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle\right) =$$
$$= \frac{i}{\hbar}\langle\psi|\hat{H}\,\hat{A}|\psi\rangle + \langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\rangle - \frac{i}{\hbar}\langle\psi|\hat{A}\,\hat{H}|\psi\rangle$$

sau, introducând comutatorul operatorilor $\hat{H}$ şi $\hat{A}$, obţinem relaţia

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{A}\rangle = \langle\frac{\partial\hat{A}}{\partial t}\rangle + \frac{i}{\hbar}\langle\left[\hat{H}\,,\,\hat{A}\right]\rangle, \tag{2.90}$$

care ne sugerează următoarea *definiţie a derivatei totale a unui operator în raport cu timpul*:

$$\frac{d\hat{A}}{dt} = \frac{\partial\hat{A}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}\,,\,\hat{A}\right]. \tag{2.91}$$

Din relaţia (2.91) rezultă că, *pentru ca o observabilă* să nu varieze în timp, deci *să se conserve*, nu este suficient ca ea să nu depindă explicit de timp, ci *trebuie să şi comute cu hamiltonianul*. Aceasta este o modalitate specifică Mecanicii Cuantice de a exprima o *lege de conservare*.

2.4.3 Teoremele lui Ehrenfest

Afirmaţia conform căreia *legile Mecanicii Cuantice trebuie să se reducă la legi clasice pentru valori medii ale operatorilor* conduce, în cazul exemplelor pe care le vom prezenta în continuare, la aşa-numitele *teoreme ale lui Ehrenfest*.

- Fie operatorii

$$\hat{A} = x \tag{2.92}$$

şi

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}), \tag{2.93}$$

al căror comutator este

$$\left[\hat{H}\,,\,\hat{x}\right] = \left[\frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right) + V(\vec{r})\,,\,x\right] =$$
$$= \frac{1}{2m}\left[\hat{p}_x^2\,,\,x\right] = \frac{1}{2m}\left\{\hat{p}_x\left[\hat{p}_x\,,\,x\right] + \left[\hat{p}_x\,,\,x\right]\hat{p}_x\right\} = \frac{\hbar}{im}\hat{p}_x\,. \tag{2.94}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Înlocuind acest rezultat în (2.91) şi luând valoarea medie ca în (2.90), cu

$$\frac{\partial x}{\partial t} \equiv 0 \;\Rightarrow\; \langle \frac{\partial x}{\partial t} \rangle = 0 \,,$$

obţinem

$$m \frac{d}{dt} \langle x \rangle \;=\; \langle \hat{p}_x \rangle \,, \tag{2.95}$$

adică una dintre teoremele lui Ehrenfest, deoarece (2.95) nu este altceva decât legătura clasică între impuls, masă şi viteză.

- Fie, acum,

$$\hat{A} = \hat{p}_x \tag{2.96}$$

şi, cu acelaşi hamiltonian, avem comutatorul

$$\left[\hat{H}\,,\,\hat{p_x}\right] = \left[\frac{1}{2m}\left(\hat{p}_x^2 + \hat{p}_y^2 + \hat{p}_z^2\right) + V(\vec{r})\,,\,\hat{p}_x\right] =$$

$$= \left[V(\vec{r})\,,\,\hat{p}_x\right] = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial V}{\partial x} \,, \tag{2.97}$$

cu relaţii analoage pentru componentele $\hat{p}_y$ şi $\hat{p}_z$. Înlocuind în (2.91, 90), obţinem a doua teoremă a lui Ehrenfest, adică

$$\frac{d}{dt}\langle \hat{\vec{p}} \rangle \;=\; -\langle \nabla V \rangle \,, \tag{2.98}$$

ce coincide cu legea a II-a a lui Newton.

2.4.4 Relaţiile de imprecizie ale lui Heisenberg

Relaţiile de imprecizie constituie un principiu al Mecanicii Cuantice, fiind unul dintre rezultatele importante şi frumoase ale acestei discipline, exprimând limita de precizie la care putem ajunge prin metodele ei specifice, precum şi împrăştierea valorilor proprii în cazul unei stări diferite de cea proprie.[2]

[2] În cadrul formulării Schrödinger – bazată pe *postularea* ecuaţiei care îi poartă numele – a Mecanicii Cuantice "ortodoxe", relaţiile lui Heisenberg devin o *consecinţă*, putând fi *demonstrate*. Din contra, în cadrul aşa-numitei *formulări axiomatice* a Mecanicii Cuantice [34, 40], relaţiile lui Heisenberg sunt puse la baza teoriei, conducând, precum a arătat W. Heisenberg în 1925, la fundamentarea *mecanicii matriceale* [29]. Echivalenţa acestor două formalisme a fost *demonstrată* de Schrödinger, în 1926 [43].

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Să trecem acum la deducerea formei generale a *relaţiilor de imprecizie*, care exprimă matematic esenţa *principiului de incertitudine*. Pentru aceasta, vom considera două observabile, A şi B, despre care presupunem că au proprietatea

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = i\hat{C}\,, \text{ unde } \hat{C} \neq 0\,, \tag{2.99}$$

din care, printr-o conjugare hermitică, obţinem

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right]^{\dagger} = \left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right)^{\dagger} = \hat{B}^{\dagger}\hat{A}^{\dagger} - \hat{A}^{\dagger}\hat{B}^{\dagger} = \hat{B}\hat{A} - \hat{A}\hat{B} =$$
$$= \left[\hat{B}, \hat{A}\right] = -i\hat{C} = -i\hat{C}^{\dagger}\,,$$

adică operatorul $\hat{C}$ este, de asemenea, hermitic, deci $\langle\hat{C}\rangle \in \mathbf{R}$, în orice stare cuantică a sistemului. După cum se cunoaşte din statistica clasică, la efectuarea unui număr de N determinări ale mărimii fizice M, în care se obţin valorile $\{M_i\}_{i=\overline{1,N}}$, eroarea pătratică medie apărută în estimarea lui M este definită prin relaţia

$$(\Delta M)^2 = \frac{1}{N}\sum_{i=1}^{N}\left(M_i - \frac{1}{N}\sum_{k=1}^{N} M_k\right)^2\,, \tag{2.100}$$

adică

$$(\Delta M)^2 = \langle (M - \langle M\rangle)^2\rangle\,. \tag{2.101}$$

În limbajul curent, pentru prescurtarea exprimării, ΔM poartă numele de *abatere standard* a mărimii M. Ultima relaţie ne permite să scriem acum abaterile standard ale observabilelor $\hat{A}$ şi $\hat{B}$ ca fiind

$$\Delta A = \left[\left\langle\left(\hat{A} - \langle\hat{A}\rangle\right)^2\right\rangle\right]^{1/2} \;;\; \Delta B = \left[\left\langle\left(\hat{B} - \langle\hat{B}\rangle\right)^2\right\rangle\right]^{1/2}\,. \tag{2.102}$$

Introducând operatorii hermitici

$$\hat{F} = \hat{A} - \langle\hat{A}\rangle \;;\; \hat{G} = \hat{B} - \langle\hat{B}\rangle \tag{2.103}$$

care au, în mod evident, proprietăţile:

$$\begin{aligned}
&\text{a)}\quad \left[\hat{F}, \hat{G}\right] = i\hat{C}\\
&\text{b)}\quad \langle\hat{F}\rangle = \langle\hat{G}\rangle = 0\\
&\text{c)}\quad \Delta F = \left[\langle\hat{F}^2\rangle\right]^{1/2} = \Delta A\\
&\text{D)}\quad \Delta G = \left[\langle\hat{G}^2\rangle\right]^{1/2} = \Delta B\,,
\end{aligned} \tag{2.104}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

obţinem, având în vedere nonnegativitatea normei, că pentru orice $\lambda \in \mathbf{R}$ şi orice $\psi \in \mathcal{H}$, este valabilă inegalitatea

$$\| (\hat{F} - i\lambda\hat{G}) \|_\psi \geq 0 . \tag{2.105}$$

De aici, prin ridicare la pătrat, rezultă

$$\| (\hat{F} - i\lambda\hat{G}) \|_\psi^2 = \langle\psi|(\hat{F} - i\lambda\hat{G})^\dagger(\hat{F} - i\lambda\hat{G})|\psi\rangle ,$$

adică

$$\langle(\hat{F} + i\lambda\hat{G})(\hat{F} - i\lambda\hat{G})\rangle \geq 0 , \ (\forall)\, \lambda \in \mathbf{R}. \tag{2.106}$$

Sub aspect matematic, această inegalitate este esenţială în deducerea relaţiei de imprecizie satisfăcute de abaterile standard ΔA şi ΔB. Astfel, din

$$\begin{aligned} &\langle(\hat{F} + i\lambda\hat{G})(\hat{F} - i\lambda\hat{G})\rangle = \langle\hat{F}^2 - i\lambda(\hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}) + \lambda^2\hat{G}^2\rangle = \\ &= \langle\hat{G}^2\rangle\lambda^2 - i\langle[\hat{F}, \hat{G}]\rangle\lambda + \langle\hat{F}^2\rangle \geq 0 , \ (\forall)\, \lambda \in \mathbf{R}, \end{aligned} \tag{2.107}$$

rezultă, prin aplicarea proprietăţilor (2.104),

$$(\Delta B)^2\lambda^2 + \langle\hat{C}\rangle\lambda + (\Delta A)^2 \geq 0 , \ (\forall)\, \lambda \in \mathbf{R}. \tag{2.108}$$

În cazurile particulare, când ψ ar fi o stare proprie a lui B, avem relaţiile

$$\begin{aligned} &\text{a)} \ \ (\Delta B)^2 \equiv 0 \\ &\text{b)} \ \ \langle\hat{C}\rangle = -i\langle\psi|\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}|\psi\rangle = -i\{\beta\langle\hat{A}\rangle - \beta\langle\hat{A}\rangle\} \equiv 0 , \end{aligned} \tag{2.109}$$

adică (2.108) capătă forma particulară

$$(\Delta A)^2 \geq 0 , \tag{2.110}$$

şi, respectiv, dacă ψ este o stare proprie a lui A, obţinem că

$$\begin{aligned} &\text{a)} \ \ (\Delta A)^2 \equiv 0 \\ &\text{b)} \ \ \langle\hat{C}\rangle = -i\{\alpha\langle\hat{B}\rangle - \alpha\langle\hat{B}\rangle\} \equiv 0 , \end{aligned} \tag{2.111}$$

deci (2.108) devine

$$(\Delta B)^2\lambda^2 \geq 0. \tag{2.112}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Acestea demonstrează că, în cazuri particulare, inegalitatea (2.108) este "automat" satisfăcută, urmând să analizăm acum cazul general al unei stări cuantice oarecare, când $\langle \hat{C} \rangle \neq 0$, $\Delta A > 0$ şi $\Delta B > 0$. După cum ştim din algebra elementară, condiţia ca inegalitatea (2.108) să fie îndeplinită, oricare ar fi $\lambda \in \mathbf{R}$, este ca discriminantul membrului stâng să fie nepozitiv, adică

$$|\langle C \rangle|^2 - 4\,(\Delta A)^2\,(\Delta B)^2 \leq 0\,, \tag{2.113}$$

de unde obţinem imediat *forma generală a relaţiilor de imprecizie*

$$\Delta A\,\Delta B \geq \frac{1}{2}\,|\langle \hat{C} \rangle|\,. \tag{2.114}$$

Adjectivul "generală" şi pluralul "relaţii" provin de la faptul că microsistemul considerat este *oarecare*, iar A şi B pot reprezenta *orice* pereche de observabile necomutative ale sale. Relaţiile de imprecizie (2.114) fac parte integrantă din însăşi esenţa Mecanicii Cuantice, motiv pentru care pot fi ridicate la rangul de *principiu de incertitudine*, al cărui enunţ este următorul: *În orice stare cuantică a oricărui microsistem, determinarea simultană, cu precizie absolută, a valorilor oricăror două observabile necomutative ale sistemului este imposibilă, iar produsul abaterilor standard ale celor două observabile, în oricare dintre stările sistemului, verifică relaţia de imprecizie* (2.114).

Dacă observabilele A şi B sunt chiar operatorii $\hat{A} = \hat{p}_x$ şi $\hat{B} = x$, atunci, deoarece $[\hat{p}_x\,,\,x] = \hbar/i$, relaţia (2.114) capătă forma sa binecunoscută

$$\Delta p_x\,\Delta x \geq \frac{\hbar}{2}\,, \tag{2.115}$$

care exprimă faptul că, *în cazul oricărei microparticule, o coordonată şi impulsul canonic conjugat acesteia nu se pot determina simultan, cu precizie absolută.*

În încheierea acestui subparagraf, dorim să facem câteva comentarii, fără a insista prea mult asupra semnificaţiilor profunde pe care le are principiul de incertitudine, recomandând cititorului, din nou, lucrarea [32]. În primul rând, constatăm că, în microcosmos, determinarea precisă a condiţiilor iniţiale de tip clasic este imposibilă, deci nici mişcarea clasică a microparticulei nu va putea fi prevăzută în mod exact – noţiunea de traiectorie îşi pierde sensul –, motiv pentru care relaţiile de imprecizie impuls-coordonată au fost denumite şi *relaţii de nedeterminare.*

În al doilea rând, relaţiile de imprecizie exprimă faptul că macroinstrumentul de care ne servim la efectuarea măsurătorilor se găseşte în interacţiune cu

B.C.U. „M. EMINESCU" IAȘI
FIZICĂ

microobiectul, afectând rezultatul măsurătorii şi introducând erori. Spre deosebire de fizica clasică, unde nu avem nici o limitare principială a preciziei de măsurare, structura matematică a Mecanicii Cuantice este fundamentată pe interpretarea probabilistă a funcţiei de undă, presupunând o limitare a preciziei măsurătorilor simultane asupra observabilelor incomensurabile, precum şi o împrăştiere a valorilor proprii ale fiecăreia dintre aceste observabile, în cazul unei stări cuantice diferite de oricare dintre stările proprii ale acestora.

În sfârşit, în anul 1933, Fürth a demonstrat, chiar în cadrul statisticii clasice, existenţa unei relaţii de imprecizie de tip impuls-coordonată, ceea ce exprimă faptul că relaţiile lui Heisenberg îşi au originea în înseşi metodele statistice utilizate în studiul microcosmosului, atestând faptul că imprecizia este datorată metodei şi nu presupune un indeterminism filosofic.

2.4.5 Aplicaţii

În acest subparagraf, vom arăta utilitatea relaţiilor de imprecizie impuls-coordonată în estimarea energiei fundamentale a unor microsisteme simple, cum ar fi: oscilatorul liniar armonic, atomul de hidrogen şi atomul de heliu.

- *Estimarea energiei de zero a oscilatorului liniar armonic.*
  După cum am văzut în paragraful 1.4.2 al capitolului anterior, oscilatorul liniar armonic este un sistem conservativ, cu un singur grad de libertate, $x\,(-\infty,\infty)$, descris de hamiltonianul

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}x^2 .$$

Deoarece comutatorul (2.94), pentru un singur grad de libertate, devine

$$\left[\hat{H},\hat{x}\right] = \frac{1}{2m}\left[\hat{p}^2,\hat{x}\right] = \frac{\hbar}{i}\frac{\hat{p}}{m} \neq 0, \tag{2.116}$$

spunem că observabilele H şi x sunt incomensurabile şi, atunci, funcţiile proprii ale lui $\hat{H}$, în raport cu care se exprimă funcţia de stare $\Psi(x,t)$ a sistemului, nu sunt şi funcţii proprii ale lui $\hat{x}$. Astfel, în orice stare proprie a lui $\hat{H}$, când $\Delta H \equiv 0$, observabila x va prezenta o abatere standard $\Delta x > 0$. Evident, aceasta va exista şi în cazul stării proprii de energie minimă. Atunci, din relaţia de imprecizie impuls-coordonată, (2.115),

BCU IAȘI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

rezultă că impulsul microparticulei va prezenta, şi el, o abatere minimă

$$\Delta p = \frac{1}{\Delta x}\frac{\hbar}{2}\,. \tag{2.117}$$

Ajungem astfel la concluzia că, sub aspect cuantic, hamiltonianul oscilatorului va fi în mod esenţial pozitiv

$$H = \frac{\hbar^2}{8m}\frac{1}{(\Delta x)^2} + \frac{1}{2}m\omega^2(\Delta x)^2 > 0\,. \tag{2.118}$$

Impunând condiţia de minim a hamiltonianului, în raport cu abaterea standard, adică

$$\frac{dH}{d(\Delta x)} = m\omega^2(\Delta x) - \frac{\hbar^2}{4m}\frac{1}{(\Delta x)^3} = 0\,, \tag{2.119}$$

obţinem

$$(\Delta x)_0 = \left[\frac{\hbar}{2m\omega}\right]^{1/2} \tag{2.120}$$

şi observăm că, pentru $\Delta x = (\Delta x)_0$, avem:

$$\left.\frac{d^2H}{d(\Delta x)^2}\right|_{\Delta x=(\Delta x)_0} = m\omega^2 + \frac{3\hbar^2}{4m}\frac{1}{(\Delta x)_0^4} = 4m\omega^2 > 0\,, \tag{2.121}$$

adică hamiltonianul are, în $(\Delta x)_0$, o valoare minimă

$$E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}\,.$$

Expresia de mai sus reprezintă energia de zero, de origine eminamente cuantică, a oscilatorului armonic ideal şi coincide cu cea găsită în paragraful 1.4.2 dedicat rezolvării ecuaţiei Schrödinger pentru oscilatorul liniar armonic.

- *Estimarea energiei fundamentale a atomului de hidrogen.*
  Şi acest sistem a fost discutat, în detaliu, în paragraful 1.4.4. În continuare, vom utiliza pentru hamiltonianul sistemului,

$$H = \frac{1}{2m}|\vec{p}|^2 - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}\,, \tag{2.122}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

expresia simplificată

$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}, \tag{2.123}$$

unde $p = m\dot{r}$ este impulsul canonic conjugat coordonatei radiale, motivată de faptul că, în starea fundamentală a electronului în atomul de hidrogen, modurile rotaţionale de mişcare nu sunt excitate. Cum

$$\left[\hat{H}, \hat{r}\right] = -\frac{\hbar}{i}\frac{\hat{p}}{m} \neq 0,$$

rezultă, în mod analog cazului anterior, că va exista o dispersie a observabilei r, adică $\Delta r > 0$, şi o dispersie a observabilei p,

$$\Delta p \approx \frac{\hbar}{\Delta r}.$$

În raport cu acestea, hamiltonianul sistemului devine

$$H = \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{(\Delta r)^2} - \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\Delta r}. \tag{2.124}$$

Impunând condiţiile de minim:

$$\begin{aligned} &\frac{dH}{d\Delta r}\left[(\Delta r)_0\right] = 0, \\ &\frac{d^2H}{d(\Delta r)^2}\left[(\Delta r)_0\right] > 0, \end{aligned} \tag{2.125}$$

găsim că, pentru

$$(\Delta r)_0 = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{me^2}, \tag{2.126}$$

hamiltonianul prezintă un minim ce corespunde exact energiei

$$E_H = -\frac{m}{2}\left[\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar}\right]^2 \tag{2.127}$$

a nivelului fundamental în atomul de hidrogen.

Observăm că, în cazul acestor două exemple, rezultatele obţinute au exact aceeaşi formă cu cea găsită prin integrarea ecuaţiei Schrödinger, pentru sistemele considerate. Să trecem acum la un sistem mai complicat, care nu este integrabil exact prin nici una dintre metodele teoretice utilizate în Mecanica Cuantică.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

- *Energia stării fundamentale a atomului de heliu.*
Hamiltonianul acestui sistem, format din doi electroni, are expresia relativ complicată

$$H = \frac{1}{2m}|\vec{p}_1|^2 + \frac{1}{2m}|\vec{p}_2|^2 - \frac{2e^2}{4\pi\varepsilon_0}\left(\frac{1}{r_1}+\frac{1}{r_2}\right) + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{|\vec{r}_1-\vec{r}_2|}. \quad (2.128)$$

Presupunem că nu numai modurile rotaţionale nu sunt excitate, deci $|\vec{p}_1| = p_1 = m\dot{r}_1$ şi $|\vec{p}_2| = p_2 = m\dot{r}_2$, dar şi că starea fundamentală prezintă o simetrie maximală, adică $p_1 = p_2 = p$ şi $r_1 = r_2 = r$ (în valoare absolută), iar $|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| = 2r$. Rezultă astfel o formă simplificată a hamiltonianului,

$$H = \frac{p^2}{m} - \frac{7e^2}{8\pi\varepsilon_0 r} \quad (2.129)$$

care, prin aceeaşi metodă ca în exemplele anterioare, devine

$$H = \frac{\hbar^2}{m}\frac{1}{(\Delta r)^2} - \frac{7e^2}{8\pi\varepsilon_0}\frac{1}{\Delta r}. \quad (2.130)$$

Condiţia de extremum,

$$\left.\frac{dH}{d(\Delta r)}\right|_{(\Delta r)_0} = \frac{1}{(\Delta r)_0^2}\left[\frac{7e^2}{8\pi\varepsilon_0} - \frac{2\hbar^2}{m}\frac{1}{(\Delta r)_0}\right] = 0, \quad (2.131)$$

ne furnizează valoarea

$$(\Delta r)_0 = \frac{16\pi\varepsilon_0\hbar^2}{7me^2}, \quad (2.132)$$

pentru care hamiltonianul capătă valoarea minimă corespunzătoare energiei pe stare fundamentală a atomului de heliu

$$E_{He} = -m\left[\frac{7e^2}{16\pi\varepsilon_0\hbar}\right]^2, \quad (2.133)$$

adică

$$E_{He} = \frac{49}{8}E_H. \quad (2.134)$$

Acest rezultat este în foarte bună concordanţă cu cel obţinut prin aplicarea metodei perturbative, pe care o vom prezenta în capitolul 4 şi cu

RCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

cel experimental, $E_{exp} = -78,6\ eV$. Este remarcabil faptul că o metodă atât de simplă, bazată pe relaţia de imprecizie impuls-coordonată, ne dă o estimare cu o eroare relativă de numai

$$\frac{\Delta E}{E} = \frac{E_{He} - E_{exp}}{E_{exp}} = 5,9\,\%$$

a energiei fundamentale a unui sistem cuantic complex, neintegrabil exact prin metodele teoretice ale Mecanicii Cuantice.

2.5 Mecanica matriceală

Formalismul matematic al Mecanicii Cuantice s-a dezvoltat, la început, pe două direcţii aparent independente şi anume: cea ondulatorie, iniţiată de Louis de Broglie [11], şi cea matriceală, dezvoltată de Werner Heisenberg [29]. Este meritul lui Erwin Schrödinger să stabilească, în 1926, legătura dintre cele două formalisme [43].

2.5.1 Reprezentarea matriceală a operatorilor

Fiind dată o bază, $\{|i\rangle\}$, în spaţiul vectorilor de stare, vom ataşa fiecărui operator liniar, $\hat{A}$, o matrice, (A), ale cărei elemente sunt definite prin relaţia

$$A_{ik} = \langle i|\hat{A}|k\rangle \tag{2.135}$$

şi alcătuiesc matricea

$$(A) = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \dots \\ A_{21} & A_{22} & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots \end{pmatrix}. \tag{2.136}$$

Pentru suma şi produsul operatorilor $\hat{A}$ şi $\hat{B}$, adică

$$\hat{S} = \hat{A} + \hat{B}\ ,\ \hat{P} = \hat{A}\,\hat{B}, \tag{2.137}$$

vom obţine, din (2.135), elementele de matrice

$$S_{ik} = \langle i|\hat{S}|k\rangle = \langle i|(\hat{A} + \hat{B})|k\rangle =$$
$$= \langle i|\hat{A}|k\rangle + \langle i|\hat{B}|k\rangle = A_{ik} + B_{ik}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi, respectiv,

$$P_{ik} = \langle i|\hat{P}|k\rangle = \langle i|\hat{A}\,\hat{B}|k\rangle = \langle i|\hat{A}\hat{I}\hat{B}|k\rangle = \\ = \sum_j \langle i|\hat{A}|j\rangle\langle j|\hat{B}|k\rangle = \sum_j A_{ij}\,B_{jk}\,.$$

Dacă $\hat{A}^\dagger$ este operatorul adjunct al lui $\hat{A}$, atunci acestuia îi corespunde matricea notată cu $(A)^\dagger$ şi numită *matrice adjunctă*, cu elementele

$$A^\dagger_{ik} = \langle i|\hat{A}^\dagger|k\rangle = \langle k|\hat{A}|i\rangle^* = A^*_{ki}\,. \tag{2.138}$$

Observăm că *operatorului adjunct lui* $\hat{A}$, adică $A^\dagger$, *îi corespunde matricea adjunctă*, notată cu $(A)^\dagger$, care se obţine din (A) prin transpunere şi conjugare complexă, adică

$$(A)^\dagger = (A)^{T*}\,. \tag{2.139}$$

Cunoaşterea matricei (A) *caracterizează perfect operatorul* $\hat{A}$. Într-adevăr, operatorul $\hat{A}$ face ca unui *ket* $|\varphi\rangle$ să îi corespundă univoc un *ket* $|\psi\rangle$, adică să avem relaţia

$$|\psi\rangle = \hat{A}\,|\varphi\rangle\,, \tag{2.140}$$

din care, prin înmulţirea cu $\langle i|$ şi intercalarea operatorului identitate $\hat{I}$, (2.75), obţinem

$$\langle i|\psi\rangle = \sum_j \langle i|\hat{A}|j\rangle\langle j|\varphi\rangle\,. \tag{2.141}$$

Dar vectorii $|\varphi\rangle$ sau $|\psi\rangle$ sunt determinaţi dacă se cunosc componentele lor, $\langle j|\varphi\rangle$ sau $\langle i|\psi\rangle$, în baza ortonormală $\{|i\rangle\}$. Considerând aceste componente dispuse în matricea unicolonară

$$(\varphi) = \begin{pmatrix} \langle 1|\varphi\rangle \\ \langle 2|\varphi\rangle \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix}, \tag{2.142}$$

relaţia (2.140) devine

$$(\psi) = (A)\,(\varphi)\,, \tag{2.143}$$

confirmând afirmaţia de mai sus.

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Procedând în acelaşi mod cu conjugata hermitică a relaţiei (2.140), adică

$$\langle\psi| = \langle\varphi|\hat{A}^\dagger\,, \tag{2.144}$$

pe care o înmulţim scalar cu $|i\rangle$ şi îi intercalăm operatorul identitate, obţinem relaţia

$$\langle\psi|i\rangle = \sum_j \langle\varphi|j\rangle\langle j|\hat{A}^\dagger|i\rangle \tag{2.145}$$

care ne permite să asociem vectorului *bra* $\langle\varphi|$ matricea unilinie

$$(\varphi) = \begin{pmatrix} \langle\varphi|1\rangle & \langle\varphi|2\rangle & \dots \end{pmatrix}, \tag{2.146}$$

aducând pe (2.144) la forma sa matriceală

$$(\psi) = (\varphi)\,(A)^\dagger\,. \tag{2.147}$$

În concluzie, după fixarea bazei ortonormale pe $\mathcal{H}$, vectorii şi operatorii vor fi reprezentaţi prin numere complexe ce alcătuiesc matrice, diferitele operaţii vectoriale fiind înlocuite cu operaţii cu matrice. De exemplu, calculul produsului scalar $\langle\varphi|\psi\rangle$ revine la un produs de forma

$$\langle\varphi|\psi\rangle = (\varphi)\,(\psi) = \begin{pmatrix} d_1^* & d_2^* & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} = \sum_i d_i^*\, c_i\,. \tag{2.148}$$

Intercalarea operatorului $\hat{A}$ în interiorul produsului scalar conduce la inserarea matricei (A) între matricele corespunzătoare vectorilor *bra* şi *ket*, adică

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = (\varphi)\,(A)\,(\psi) =$$

$$= \begin{pmatrix} d_1^* & d_2^* & \dots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & \cdot & \cdot & \cdot \\ A_{21} & A_{22} & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \end{pmatrix} = \sum_{i,j} d_i^*\, A_{ij}\, c_j\,. \tag{2.149}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

2.5.2 Observabile ca matrice

După cum am văzut în cadrul formalismului ondulatoriu al Mecanicii Cuantice, fiecare observabilă se obţine prin exprimarea necuantică a mărimii fizice respective în funcţie de coordonate şi impulsuri, care se înlocuiesc apoi cu operatorii hermitici corespunzători. Vom urma aceeaşi cale şi în mecanica matriceală, înlocuind operatorii cu matricele corespunzătoare unei anumite reprezentări.

Pentru aceasta, trebuie să răspundem la următoarele două întrebări:

1. *Cum ataşăm matrice observabilelor de bază, adică coordonatelor q_k şi impulsurilor p_j?* Evident, acestea trebuie să fie hermitice, adică

$$\begin{aligned} (q_k)^\dagger &= (q_k) \\ (p_j)^\dagger &= (p_j) \end{aligned} \tag{2.150}$$

şi să satisfacă relaţiile de comutatori (2.46, 48) în formă matriceală, adică

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad [(p_j)\,,\,(q_k)] = \frac{\hbar}{i}\,\delta_{jk}\,I \\ &\text{b)} \quad [(q_j)\,,\,(q_k)] = 0 \\ &\text{c)} \quad [(p_j)\,,\,(p_k)] = 0\,, \end{aligned} \tag{2.151}$$

unde I este matricea unitate. Dacă pentru noi, după calea parcursă până acum, relaţia (2.151.a) este o consecinţă firească, în lucrarea sa de bază, W. Heisenberg a impus-o ca fiind *relaţia fundamentală a mecanicii matriceale.* Acum devine clar că oricărei observabile, A, exprimată în funcţie de coordonate şi impulsuri, îi corespunde matricea hermitică

$$(A)^\dagger = (A) \tag{2.152}$$

sau, pe componente,

$$A^*_{ik} = A_{ki}\,, \tag{2.153}$$

obţinută prin înlocuirea coordonatelor q_k şi a impulsurilor p_j cu matricele hermitice corespunzătoare, (q_k) şi (p_j), ce satisfac relaţiile (2.150, 151).

2. A doua întrebare se referă la *modul în care se obţin valorile proprii ale unei observabile.* Pentru a da un răspuns, să revenim la relaţia de legătură dintre mecanicile ondulatorie şi matriceală, (2.135). Presupunând că baza

aleasă este formată tocmai din vectorii proprii ai observabilei studiate, deci

$$\hat{A}|j\rangle = A_j\,|j\rangle\,, \tag{2.154}$$

aducem relaţia (2.135) la forma

$$A_{ij} = \langle i|\hat{A}|j\rangle = A_j\,\delta_{ij}\,, \tag{2.155}$$

care pune în evidenţă faptul că matricea (A) este diagonală (elementele extradiagonale fiind, evident, nule). În consecinţă, pentru a găsi valorile proprii ale observabilei A, trebuie să exprimăm matricele asociate coordonatelor şi impulsurilor în aşa fel încât matricea (A) să fie diagonală, elementele de pe diagonală fiind chiar valorile proprii ale lui A. În plus, din condiţia de hermiticitate (2.153), rezultă

$$A^*_{ii} = A_{ii}\,, \tag{2.156}$$

adică, aşa cum era de aşteptat, valorile proprii ale observabilei A sunt reale.

2.5.3 Schimbarea reprezentărilor în spaţiul stărilor

Ne propunem să studiem modalitatea de transformare a elementelor matriceale ale operatorilor şi vectorilor *bra* şi *ket* în cazul trecerii de la o bază ortonormală la alta, în spaţiul vectorilor de stare $\mathcal{H}$.

Notând cele două baze ortonormale cu $\{|i\rangle\}$ şi $\{|v\rangle\}$, vom încerca să găsim o legătură între elementele matriceale

$$A_{ij} = \langle i|\hat{A}|j\rangle$$

şi

$$A'_{vw} = \langle v|\hat{A}|w\rangle\,, \tag{2.157}$$

ale operatorului $\hat{A}$. Pentru aceasta, scriem ultima relaţie sub forma

$$A'_{vw} = \sum_i \sum_j \langle v|i\rangle\langle i|\hat{A}|j\rangle\langle j|w\rangle \tag{2.158}$$

şi, notând cu (U) matricea de schimbare a bazei, cu elementele

$$U_{jw} = \langle j|w\rangle\,,\ \text{deci}\ U^\dagger_{vi} = \langle i|v\rangle^* = \langle v|i\rangle\,, \tag{2.159}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

relaţia (2.158) devine

$$A'_{vw} = \sum_i \sum_j U^\dagger_{vi} A_{ij} U_{jw}\,, \tag{2.160}$$

sau, în formă matriceală,

$$(A') = (U)^\dagger (A)(U)\,. \tag{2.161}$$

O consecinţă imediată a relaţiei (2.158) este aceea că *trasa matricei* (A), definită ca suma elementelor de pe diagonală, este invariantă la schimbarea bazei ortonormale. Într-adevăr, scriind pe (2.158) ca fiind

$$A'_{vw} = \sum_i \sum_j \langle j|w\rangle\langle v|i\rangle\langle i|\hat{A}|j\rangle$$

şi, sumând elementele de pe diagonală, obţinem egalitatea celor două trase, adică

$$\begin{aligned}\sum_v A'_{vv} &= \sum_i \sum_j \sum_v \langle j|v\rangle\langle v|i\rangle\langle i|\hat{A}|j\rangle = \\ &= \sum_i \sum_j \langle j|i\rangle\langle i|\hat{A}|j\rangle = \sum_j \langle j|\hat{A}|j\rangle = \sum_j A_{jj}\,.\end{aligned}$$

Matricea (U), cu elementele (2.159), realizează trecerea între vectorii celor două baze, prin relaţiile

$$\begin{aligned}&\text{(i)} \quad |v\rangle = \sum_i |i\rangle\langle i|v\rangle = \sum_i |i\rangle\, U_{iv} \\ &\text{(ii)} \quad |i\rangle = \sum_v |v\rangle\langle v|i\rangle = \sum_v |v\rangle\, U^\dagger_{vi}\,,\end{aligned} \tag{2.162}$$

şi între vectorii bazelor duale, prin conjugatele lor hermitice, adică

$$\begin{aligned}&\text{(i)} \quad \langle v| = \sum_i \langle v|i\rangle\langle i| = \sum_i U^\dagger_{vi}\,\langle i| \\ &\text{(ii)} \quad \langle i| = \sum_v \langle i|v\rangle\langle v| = \sum_v U_{iv}\,\langle v|\,.\end{aligned} \tag{2.163}$$

În sfârşit, cele două baze fiind ortonormale, rezultă că matricea (U) este *unitară*, deoarece putem scrie relaţiile:

$$\begin{aligned}\delta_{vw} = \langle v|w\rangle &= \sum_i \sum_j \langle v|i\rangle\langle i|j\rangle\langle j|w\rangle = \\ &= \sum_i \langle v|i\rangle\langle i|w\rangle = \sum_i U^\dagger_{vi}\, U_{iw}\,,\end{aligned} \tag{2.164}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

adică

$$(U)^{\dagger}(U) = (I), \text{ sau } (U)^{\dagger} = (U)^{-1}. \tag{2.165}$$

Considerăm un vector *ket*, $|\psi\rangle$, căruia îi asociem matricea unicoloană (ψ) şi ale cărui componente, ψ_j, se transformă la trecerea de la baza $\{|j\rangle\}$ la baza $\{|v\rangle\}$ prin relaţia

$$\psi'_v = \sum_j U^{\dagger}_{vj}\psi_j = \sum_j \langle v|j\rangle\langle j|\psi\rangle = \langle v|\psi\rangle, \tag{2.166}$$

adică

$$(\psi') = (U)^{\dagger}(\psi). \tag{2.167}$$

Conjugând hermitic formula (2.167), obţinem transformata matricei unilinie asociate unui vector *bra*, adică

$$(\varphi') = (\varphi)(U), \tag{2.168}$$

sau, pe componente,

$$\varphi'_v = \sum_j \varphi_j U_{jv} = \sum_j \langle\varphi|j\rangle\langle j|v\rangle = \langle\varphi|v\rangle. \tag{2.169}$$

Relaţiile (2.167) şi (2.168) ne permit să demonstrăm că transformările asociate operatorilor unitari $\hat{U}$, reprezentaţi prin matricele unitare (U), conservă produsul scalar, adică

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{U}\hat{U}^{\dagger}|\psi\rangle = \langle\varphi'|\psi'\rangle, \tag{2.170}$$

precum şi expresii mai complicate, de tipul

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \langle\varphi|\hat{U}\hat{U}^{\dagger}\hat{A}\hat{U}\hat{U}^{\dagger}|\psi\rangle = \langle\varphi'|\hat{A}'|\psi'\rangle, \tag{2.171}$$

obţinute prin intercalarea unor operatori, între cei doi vectori ai produsului scalar.

Revenind la matricele asociate observabilelor, ne-ar interesa, prin prisma celor discutate în paragraful anterior, acele transformări care diagonalizează matricele, punând în evidenţă valorile proprii ale operatorilor corespunzători. Astfel, diagonalizarea unei matrice, (A), se face cu ajutorul matricei unitare (U) care, prin intermediul transformării

$$(A') = (U)^{\dagger}(A)(U), \tag{2.172}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

conduce la o matrice diagonală, (A'). Înmulţind ultima relaţie, din stânga, cu (U), obţinem

$$(U)\,(A') = (A)\,(U)\,, \tag{2.173}$$

sau

$$\sum_k U_{ik}\,A'_{kj} = \sum_k A_{ik}\,U_{kj}\,, \tag{2.174}$$

şi impunem ca matricea (A') să fie diagonală. În această ipoteză, relaţia (2.174) devine

$$\sum_k A_{ik}\,U_{kj} - U_{ij}\,A'_{jj} = 0\,, \tag{2.175}$$

conducând la următorul sistem liniar şi omogen, pentru necunoscutele U_{kj}:

$$\sum_k \left(A_{ik} - \delta_{ik}\,A'_{jj}\right) U_{kj} = 0\,, \tag{2.176}$$

care admite soluţii nebanale dacă

$$\det\left(A_{ik} - \delta_{ik}\,A'_{jj}\right) = 0\,. \tag{2.177}$$

Notând cu

$$A'_{11} = A'_1\,,\ A'_{22} = A'_2\,,\ etc. \tag{2.178}$$

soluţiile acestui sistem, adică (A') este matricea diagonală

$$(A') = \begin{pmatrix} A'_1 & 0 & \cdots \\ 0 & A'_2 & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdots \end{pmatrix}, \tag{2.179}$$

obţinem următoarea formă a sistemului (2.176)

$$\begin{aligned} &\sum_k (A_{ik} - \delta_{ik}\,A'_1)\,U_{k1} = 0 \\ &\sum_k (A_{ik} - \delta_{ik}\,A'_2)\,U_{k2} = 0 \\ &\cdots\cdots \end{aligned} \tag{2.180}$$

unde fiecare sumă este un sistem liniar şi omogen de ecuaţii (deoarece $i = 1, 2, \ldots$) pentru o coloană $\{U_{k1}, U_{k2}, \ldots\}$ a matricei necunoscute (U). Condiţia de unitaritate a matricei (U) determină constantele arbitrare ce apar la soluţionarea ecuaţiilor.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

2.5.4 Derivarea matricelor

Definiţia 7 *Derivata totală în raport cu timpul a matricei* (A) *este dată de relaţia*

$$\frac{d(A)}{dt} = \frac{\partial(A)}{\partial t} + \frac{i}{\hbar}\,[(H),(A)]\,. \tag{2.181}$$

Definiţia 7 este în concordanţă cu relaţia (2.91), valabilă pentru operatorii liniari, iar derivata parţială se efectuează derivând parţial fiecare element al matricei (A), în raport cu t.

Pentru observabile care sunt funcţii întregi de variabilele canonice p şi q – adică se constituie exclusiv prin operaţii de adunare, înmulţire şi multiplicare cu scalari – derivarea se efectuează în mod formal, ca în exemplul

$$\frac{\partial}{\partial(q)}\,[(p)(q)^n + (p)^n(q)] = n\,(p)(q)^{n-1} + (p)^n\,,$$

fiind adevărate relaţiile:

$$\frac{\partial(A)}{\partial(q)} = \frac{i}{\hbar}\,[(p),(A)] \tag{2.182}$$

$$\frac{\partial(A)}{\partial(p)} = \frac{i}{\hbar}\,[(A),(q)]\,. \tag{2.183}$$

Pentru a demonstra ecuaţia (2.182), să considerăm următoarele situaţii:

(i) Pentru $(A) = (q)$ şi $(A) = (p)$, relaţia (2.182) este adevărată, deoarece avem:

$$\frac{\partial(q)}{\partial(q)} = \frac{i}{\hbar}\,[(p),(q)] \;\Rightarrow\; 1 = 1$$

şi, respectiv,

$$\frac{\partial(p)}{\partial(q)} = \frac{i}{\hbar}\,[(p),(p)] \;\Rightarrow\; 0 = 0\,.$$

(ii) În ipoteza că relaţia (2.182) este adevărată pentru matricele (A) şi (B), rezultă că ea este valabilă şi pentru suma şi produsul acestora, adică pentru

$$(S) = (A) + (B)\;;\;\; (P) = (A)(B)\,, \tag{2.184}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

deoarece

$$\frac{\partial(S)}{\partial(q)} = \frac{\partial(A)}{\partial(q)} + \frac{\partial(B)}{\partial(q)} = \frac{i}{\hbar}\{[(p),(A)] + [(p),(B)]\} =$$
$$= \frac{i}{\hbar}[(p),(A)+(B)] = \frac{i}{\hbar}[(p),(S)]$$

şi, respectiv,

$$\frac{\partial(P)}{\partial(q)} = \frac{\partial(A)}{\partial(q)}(B) + (A)\frac{\partial(B)}{\partial(q)} =$$
$$= \frac{i}{\hbar}\{[(p),(A)](B) + (A)[(p),(B)]\} =$$
$$= \frac{i}{\hbar}[(p),(A)(B)] = \frac{i}{\hbar}[(p),(P)].$$

(iii) Înmulţirea cu scalari nu ridică probleme, deoarece scalarii pot fi scoşi atât în faţa operatorului de derivare, cât şi a parantezei pătratice care indică comutatorul.

Din (i), (ii) şi (iii) rezultă, prin inducţie completă, că relaţia (2.182) este adevărată pentru orice funcţie întreagă de (p) şi (q).

Demonstrarea lui (2.183) fiind întru totul analoagă, să trecem la o consecinţă deosebit de importantă: în cazul particular $(A) = (H)$, relaţiile (2.182, 183) devin

$$\frac{\partial(H)}{\partial(q)} = \frac{i}{\hbar}[(p),(H)]; \tag{2.185}$$

$$\frac{\partial(H)}{\partial(p)} = \frac{i}{\hbar}[(H),(q)], \tag{2.186}$$

iar expresia (2.181), pentru $(A) = (p)$, respectiv $(A) = (q)$, capătă formele explicite:

$$(\dot{p}) = \frac{i}{\hbar}[(H),(p)] \tag{2.187}$$

$$(\dot{q}) = \frac{i}{\hbar}[(H),(q)]. \tag{2.188}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Prin compararea relaţiilor (2.185, 186) respectiv cu (2.187, 188) rezultă valabilitatea *ecuaţiilor canonice ale lui Hamilton*, adică

$$(\dot{p}) = -\frac{\partial(H)}{\partial(q)}\,; \tag{2.189}$$

$$(\dot{q}) = \frac{\partial(H)}{\partial(p)}\,. \tag{2.190}$$

2.5.5 Exemplu: oscilatorul liniar armonic

În încheierea acestui paragraf, să exemplificăm metoda matriceală pentru cazul oscilatorului liniar armonic, descris de hamiltonianul

$$(H) = \frac{1}{2\mu}(p)^2 + \frac{1}{2}\mu\omega^2(q)^2\,, \tag{2.191}$$

unde, pentru a elimina necesitatea unei transformări unitare, nu vom specifica de la început forma concretă a matricelor (p) şi (q). Urmărim să determinăm valorile proprii ale energiei şi, în consecinţă, vom impune ca hamiltonianul să fie diagonal, adică de forma

$$(H) = \begin{pmatrix} E_0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & E_1 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & E_2 & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdots \end{pmatrix}. \tag{2.192}$$

Explicităm relaţiile (2.185, 186). Astfel, elementele cu indicii i şi k ale comutatorului lui (H), dat de (2.192), cu (q), sunt:

$$[(H)\,,\,(q)]_{ik} = \sum_j (H_{ij}\,q_{jk} - q_{ij}\,H_{jk}) = (E_i - E_k)\,q_{ik}\,, \tag{2.193}$$

iar ale comutatorului lui (p) cu (H) sunt:

$$[(p)\,,\,(H)]_{ik} = -\,(E_i - E_k)\,p_{ik}\,. \tag{2.194}$$

Cu ajutorul derivatelor parţiale

$$\begin{aligned} \frac{\partial(H)}{\partial(q)} &= \mu\omega^2(q) \\ \frac{\partial(H)}{\partial(p)} &= \frac{1}{\mu}(p)\,, \end{aligned} \tag{2.195}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

relaţiile (2.185, 186) capătă forma

$$\begin{aligned} \mu\omega^2 q_{ik} &= -\frac{i}{\hbar}(E_i - E_k)\, p_{ik} \\ \frac{1}{\mu} p_{ik} &= \frac{i}{\hbar}(E_i - E_k)\, q_{ik}\,, \end{aligned} \tag{2.196}$$

de unde, prin eliminarea lui p_{ik}, obţinem relaţia

$$\left[(E_i - E_k)^2 - (\hbar\omega)^2\right] q_{ik} = 0\,, \tag{2.197}$$

punând în evidenţa următoarele posibilităţi:

$$\text{sau } (E_i - E_k) = \pm\hbar\omega\,, \quad \text{sau } q_{ik} = 0\,. \tag{2.198}$$

Presupunând că

$$E_0 < E_1 < E_2 < \ldots\,, \tag{2.199}$$

obţinem atât formula uzuală de cuantificare a energiei,

$$E_i - E_{i-1} = \hbar\omega \;(i = 1, 2, \ldots)\,, \tag{2.200}$$

adică

$$E_n = E_0 + n\hbar\omega\,, \tag{2.201}$$

cât şi elementele nenule ale matricei (q),

$$q_{i,i-1} \neq 0\,;\; q_{i-1,i} \neq 0\,, \tag{2.202}$$

în rest, $q_{ik} = 0$. De asemenea, din (2.196, 200, 202), rezultă că singurele elemente diferite de zero ale lui p_{ik} vor fi

$$p_{i,i-1} = i\mu\omega\, q_{i,i-1}\;;\; p_{i-1,i} = -i\mu\omega\, q_{i-1,i}\,. \tag{2.203}$$

Suntem acum în măsură să impunem satisfacerea relaţiei de comutare (2.151.a), adică

$$[(p)\,,\,(q)]_{ik} = \frac{\hbar}{i}\,\delta_{ik} \tag{2.204}$$

care se reduce la relaţia banală $0 = 0$, cu excepţia cazurilor în care $k = i$ sau $k = i \pm 2$, pe care le vom verifica în continuare. Astfel, pentru $k = i + 2$, relaţia (2.204) devine

$$p_{i,i+1}\, q_{i+1,i+2} - q_{i,i+1}\, p_{i+1,i+2} = 0\,,$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

a cărei valabilitate se stabileşte imediat, utilizând (2.203). Cum, în cazul $k = i-2$, verificarea decurge analog, să ne concentrăm asupra cazului $k = i$, pentru care (2.204) capătă forma

$$p_{i,i-1}\,q_{i-1,i} + p_{i,i+1}\,q_{i+1,i} - q_{i,i-1}\,p_{i-1,i} - q_{i,i+1}\,p_{i+1,i} = \frac{\hbar}{i} \tag{2.205}$$

sau (cu ajutorul lui (2.203))

$$i\mu\omega\,(q_{i,i-1}\,q_{i-1,i} - q_{i,i+1}\,q_{i+1,i} + q_{i,i-1}\,q_{i-1,i} - q_{i,i+1}\,q_{i+1,i}) = \frac{\hbar}{i}\,, \tag{2.206}$$

de unde, ţinând cont că matricea (q) este hermitică (adică $q_{i-1,i} = q^*_{i,i-1}$), obţinem

$$|q_{i+1,i}|^2 - |q_{i,i-1}|^2 = \frac{\hbar}{2\mu\omega}\,. \tag{2.207}$$

Din forma concretă a hamiltonianului (2.192), se observă că *valoarea cea mai mică* a indicelui *este 0* şi, în consecinţă, relaţia (2.207) devine

$$|q_{10}|^2 = \frac{\hbar}{2\mu\omega} \tag{2.208}$$

sau, în general,

$$|q_{n+1,n}|^2 = \frac{\hbar}{2\mu\omega}\,(n+1)\,, \tag{2.209}$$

sugerându-ne să reprezentăm pe (q) printr-o matrice reală (cu liniile şi coloanele numerotate de la zero), cu singurele elementele nenule de forma

$$q_{n,n-1} = q_{n-1,n} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\,\sqrt{n}\,, \tag{2.210}$$

adică

$$(q) = \sqrt{\frac{\hbar}{2\mu\omega}}\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdots \end{pmatrix}. \tag{2.211}$$

În concordanţă cu (2.203), rezultă că singurele elemente nenule ale matricei (p) vor fi

$$p_{n,n-1} = -\,p_{n-1,n} = i\sqrt{\frac{\hbar\mu\omega}{2}}\,\sqrt{n}\,, \tag{2.212}$$

BUJIASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

conducând la următoarea formă concretă a matricei (p):

$$(p) = i\sqrt{\frac{\hbar\mu\omega}{2}}\begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \cdots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdots \end{pmatrix}. \tag{2.213}$$

Cu ajutorul relaţiilor (2.211) şi (2.213), putem calcula cei doi termeni din hamiltonianul (2.191), adică

$$\frac{1}{2}\mu\omega^2 (q)^2 = \frac{\hbar\omega}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 3 & 0 & \sqrt{6} & \cdots \\ \sqrt{2} & 0 & 5 & 0 & \cdots \\ 0 & \sqrt{6} & 0 & 7 & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdots \end{pmatrix} \tag{2.214}$$

$$\frac{1}{2\mu}(p)^2 = \frac{\hbar\omega}{4}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \cdots \\ 0 & 3 & 0 & -\sqrt{6} & \cdots \\ -\sqrt{2} & 0 & 5 & 0 & \cdots \\ 0 & -\sqrt{6} & 0 & 7 & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdots \end{pmatrix}, \tag{2.215}$$

şi obţinem o matrice de forma (2.192), adică

$$(H) = \frac{\hbar\omega}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 3 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 5 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 7 & \cdots \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdots \end{pmatrix}, \tag{2.216}$$

cu valorile proprii satisfăcând relaţia uzuală de cuantificare a energiei oscilatorului liniar armonic, (1.110).

2.6 Spectrul continuu

În încheierea acestui capitol, prezentăm o generalizare a formalismului *bra-ket*, propusă de Dirac, pentru cazul *spectrului continuu.*

UAIC IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Dacă şirul discret, $\{|i\rangle\}$, este înlocuit cu şirul continuu de vectori *ket* generalizaţi, $\{|\lambda\rangle\}$, satisfăcând relaţia de ortogonalitate

$$\langle\lambda'|\lambda\rangle = 0\,, \quad \lambda' \neq \lambda\,, \tag{2.217}$$

relaţiile (2.154, 71, 72) devin, respectiv,

$$\hat{L}|\lambda\rangle = L(\lambda)\,|\lambda\rangle\,, \quad \text{cu } \lambda \text{ continuu}\,, \tag{2.218}$$

$$|\psi\rangle = \int c(\lambda)\,|\lambda\rangle\,d\lambda\,, \tag{2.219}$$

$$c(\lambda') = \langle\lambda'|\psi\rangle\,. \tag{2.220}$$

Pentru ca ultima relaţie să fie adevărată, adică

$$c(\lambda') = \int c(\lambda)\langle\lambda'|\lambda\rangle\,d\lambda\,, \tag{2.221}$$

produsul

$$\langle\lambda'|\lambda\rangle \equiv \delta(\lambda' - \lambda) \tag{2.222}$$

trebuie să satisfacă condiţiile:

$$\delta(x) = \begin{cases} 0\,, & \text{pentru } x \neq 0 \\ \infty\,, & \text{pentru } x = 0 \end{cases} \tag{2.223}$$

şi

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\,dx = 1\,, \tag{2.224}$$

unde $\delta(x)$ poartă numele de *funcţia generalizată a lui Dirac* sau *distribuţia Dirac*. În mod riguros, pentru ca integrala (2.221) să existe, aplicaţia

$$\delta(x - x_0) \equiv \delta_{x_0} \tag{2.225}$$

trebuie interpretată ca o *funcţională* pe $\mathcal{F}(\mathbf{R};\mathbf{R})$,

$$\delta_{x_0} : f(x) \to f(x_0)\,, \tag{2.226}$$

(formal) definită prin

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,\delta(x - x_0)\,dx = f(x_0)\,, \quad (\forall)\, f \in \mathcal{F}\,. \tag{2.227}$$

În continuare, să considerăm două exemple.

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

1. Fie *transformata Fourier* a funcţiei $f(x)$, adică

$$\tilde{f}(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, e^{-ipx}\, dx\,, \tag{2.228}$$

pentru care este valabilă relaţia

$$f(x_0) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \tilde{f}(p)\, e^{ipx_0}\, dp\,, \tag{2.229}$$

adică dezvoltarea în *integrală Fourier* a funcţiei $f(x)$, în punctul x_0. Din ultimele două formule putem scrie, în mod formal (deoarece nu sunt satisfăcute condiţiile pentru inversarea ordinii integralelor), relaţia

$$f(x_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\, e^{-ipx}\, dx \right\} e^{ipx_0} dp = \\ = \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) \left\{ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ip(x_0-x)}\, dp \right\} dx\,.$$

Aceasta, prin trecerea lui p în $-p$ şi prin comparare cu (2.227), ne conduce la *dezvoltarea în integrală Fourier a funcţiei* δ, adică

$$\delta(x - x_0) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ip(x-x_0)} dp\,, \tag{2.230}$$

care generalizează normarea particulei libere, descrisă de funcţia de undă

$$\psi(x, p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ipx}\,.$$

2. În spaţiul $\mathcal{L}^2$, considerăm dezvoltarea

$$\psi(x_0) = \sum_i c_i\, \psi_i(x_0)\,,$$

în care înlocuim expresiile coeficienţilor cu

$$c_i = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi_i^*(x)\, \psi(x)\, dx$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi obţinem

$$\psi(x_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x) \left\{ \sum_i \psi_i^*(x)\, \psi_i(x_0) \right\} dx .$$

Comparând ultima relaţie cu (2.227), putem scrie

$$\delta(x - x_0) = \sum_i \psi_i^*(x)\, \psi_i(x_0) ,$$

ceea ce ne arată că, pentru un şir complet şi ortogonal, avem

$$\sum_i \psi_i^*(x)\, \psi_i(x_0) = 0 , \quad \text{pentru } x \neq x_0 ,$$

iar seria $\sum \psi_i^*(x)\psi_i(x)$ este divergentă.

În încheiere, să transcriem şi alte relaţii, obţinute în cadrul acestui capitol, de la cazul discret la cazul continuu. Astfel, operatorul identitate pe $\mathcal{H}$, (2.75), devine

$$\hat{I} = \int |\lambda\rangle\langle\lambda|\, d\lambda \tag{2.231}$$

şi acţionează asupra unui vector *bra* după relaţia

$$\langle\psi| = \int \langle\psi|\lambda\rangle\langle\lambda|\, d\lambda = \int c^*(\lambda)\, \langle\lambda|\, d\lambda , \tag{2.232}$$

care este conjugata hermitică a relaţiei (2.219). De asemenea, operatorul identitate (2.231) ne permite scrierea relaţiilor (2.148) şi (2.149) sub forma

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \int \langle\varphi|\lambda\rangle\langle\lambda|\psi\rangle\, d\lambda = \int b^*(\lambda) c(\lambda)\, d\lambda \tag{2.233}$$

şi, respectiv,

$$\langle\varphi|\hat{A}|\psi\rangle = \int \langle\varphi|\alpha\rangle\langle\alpha|\hat{A}|\beta\rangle\langle\beta|\psi\rangle\, d\alpha\, d\beta = \int b^*(\alpha)\, A(\alpha,\beta)\, c(\beta)\, d\alpha\, d\beta . \tag{2.234}$$

Relaţiile deduse în cadrul acestui paragraf ne permit să facem o legătură între teoria dezvoltată în spaţiul abstract al stărilor, în formalismul *bra-ket*, şi mecanica ondulatorie, în formularea Schrödinger, privită ca o realizare a spaţiului $\mathcal{H}$, prin alegerea bazei particulare a stărilor proprii ale operatorului

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

de poziţie al sistemului. Făcând o analogie cu mişcarea unei particule, descrisă de vectorul de poziţie, $\vec{r}$, componentele $\{x, y, z\}$ pot fi privite ca valori proprii ale observabilelor $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$, scrise comprimat $\hat{r}$, adică

$$\hat{r}|\vec{r}\rangle = \vec{r}|\vec{r}\rangle \,, \tag{2.235}$$

într-o bază continuă $\{|\vec{r}\rangle\}$, satisfăcând relaţiile de ortogonalitate şi închidere

$$\langle\vec{r}|\vec{r}\,'\rangle = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,') \tag{2.236}$$

şi, respectiv,

$$\int |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}\,'|\, d\vec{r} = \hat{I}\,. \tag{2.237}$$

Prin transformata Fourier a funcţiilor de stare, se poate trece de la *reprezentarea de coordonată*, descrisă mai sus şi denumită *reprezentarea* **r**, la *reprezentarea de impuls*, sau *reprezentarea* **p**, a cărei bază satisface relaţiile

$$\langle\vec{p}|\vec{p}\,'\rangle = \delta(\vec{p}-\vec{p}\,') \tag{2.238}$$

şi

$$\int |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}\,'|\, d\vec{p} = \hat{I}\,. \tag{2.239}$$

Fără a insista prea mult asupra reprezentărilor **r** şi **p**, recomandând cititorului interesat bibliografia [8], vom trece în revistă doar câteva rezultate mai importante. Astfel, funcţia de undă, în cele două baze, este de forma

$$|\psi\rangle = \int |\vec{r}\rangle\langle\vec{r}|\psi\rangle\, d\vec{r}, \tag{2.240}$$

respectiv

$$|\psi\rangle = \int |\vec{p}\rangle\langle\vec{p}|\psi\rangle\, d\vec{p}, \tag{2.241}$$

şi are componentele

$$\psi(\vec{r}) = \langle\vec{r}|\psi\rangle\,, \tag{2.242}$$

respectiv

$$\psi(\vec{p}) = \langle\vec{p}|\psi\rangle\,, \tag{2.243}$$

cu conjugatele complexe

$$\psi^*(\vec{r}) = \langle\psi|\vec{r}\rangle\,, \tag{2.244}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi, respectiv,

$$\psi^*(\vec{p}) = \langle \psi | \vec{p} \rangle . \tag{2.245}$$

Aceste relaţii ne permit calculul produsului scalar, în cele două baze, ca fiind

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int \langle \psi | \vec{r} \rangle \langle \vec{r} | \varphi \rangle \, d\vec{r} = \int \psi^*(\vec{r}) \, \varphi(\vec{r}) \, d\vec{r} \tag{2.246}$$

şi, respectiv,

$$\langle \psi | \varphi \rangle = \int \langle \psi | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \varphi \rangle \, d\vec{p} = \int \psi^*(\vec{p}) \, \varphi(\vec{p}) \, d\vec{p}. \tag{2.247}$$

Se mai poate demonstra, [26], că $|\vec{r}\rangle$ sunt vectori proprii comuni operatorilor $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$, cu valorile proprii corespunzătoare x, y, z. Deoarece $\hat{x}$, $\hat{y}$, $\hat{z}$ comută, valorile proprii ale acestora pot fi determinate simultan, în oricare dintre stările proprii, $|\vec{r}\rangle$, ale sistemului, adică acestea formează un set complet de observabile, în reprezentarea de coordonate. În mod analog, $|\vec{p}\rangle$ sunt vectori proprii comuni ai operatorilor $\hat{p_x}$, $\hat{p_y}$, $\hat{p_z}$, corespunzând valorilor proprii p_x, p_y, p_z. Fiecare vector propriu $|\vec{p}\rangle$ este specificat, în mod unic, de vectorul $\vec{p}$, ale cărui componente, p_x, p_y, p_z, sunt chiar valorile proprii ale operatorilor $\hat{p_x}$, $\hat{p_y}$, $\hat{p_z}$, ce formează un set complet de observabile, în reprezentarea de impuls.

În ceea ce priveşte trecerea de la o reprezentare la alta, aceasta se poate realiza utilizând relaţiile de ortogonalitate şi închidere, (2.236-239), şi dezvoltarea în serii Fourier a funcţionalei δ în formă tridimensională, adică

$$\int \langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{r}\,' \rangle \, d\vec{p} = \delta(\vec{r} - \vec{r}\,') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')} \, d\vec{p}. \tag{2.248}$$

Egalând integranzii din (2.248), scrişi sub forma

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle \langle \vec{p} | \vec{r}\,' \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}\,'},$$

obţinem relaţiile

$$\langle \vec{r} | \vec{p} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \tag{2.249}$$

$$\langle \vec{p} | \vec{r} \rangle = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}}, \tag{2.250}$$

BCUIASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

care permit trecerea componentelor vectorilor şi a elementelor de matrice corespunzătoare diverşilor operatori, din reprezentarea r în reprezentarea p, şi invers. De exemplu, pentru componentele vectorului $|\psi\rangle$, vom avea următoarele transformate Fourier:

$$\psi(\vec{r}) = \langle \vec{r}|\psi\rangle = \int \langle \vec{r}|\vec{p}\rangle\langle \vec{p}|\psi\rangle\, d\vec{p} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}}\psi(\vec{p})\, d\vec{p} \tag{2.251}$$

şi

$$\psi(\vec{p}) = \langle \vec{p}|\psi\rangle = \int \langle \vec{p}|\vec{r}\rangle\langle \vec{r}|\psi\rangle\, d\vec{r} = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}}\psi(\vec{r})\, d\vec{r}, \tag{2.252}$$

iar pentru operatori sunt valabile relaţiile:

$$\hat{A}(\vec{r},\vec{r}\,') \equiv \langle \vec{r}|\hat{A}|\vec{r}\,'\rangle = \int \langle \vec{r}|\vec{p}\rangle\langle \vec{p}|\hat{A}|\vec{p}\,'\rangle\langle \vec{p}\,'|\vec{r}\,'\rangle\, d\vec{p}\, d\vec{p}\,' =$$
$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\vec{p}\cdot\vec{r}-\vec{p}\,'\cdot\vec{r}\,')} \hat{A}(\vec{p},\vec{p}\,')\, d\vec{p}\, d\vec{p}\,' \tag{2.253}$$

şi

$$\hat{A}(\vec{p},\vec{p}\,') \equiv \langle \vec{p}|\hat{A}|\vec{p}\,'\rangle = \int \langle \vec{p}|\vec{r}\rangle\langle \vec{r}|\hat{A}|\vec{r}\,'\rangle\langle \vec{r}\,'|\vec{p}\,'\rangle\, d\vec{r}\, d\vec{r}\,' =$$
$$= \frac{1}{(2\pi)^3} \int e^{i(\vec{p}\,'\cdot\vec{r}\,'-\vec{p}\cdot\vec{r})} \hat{A}(\vec{r},\vec{r}\,')\, d\vec{r}\, d\vec{r}\,', \tag{2.254}$$

care pot fi explicitate pentru operatorii uzuali din fizică [26].

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Capitolul 3

Teoria cuantică a momentului cinetic

3.1 Momentul cinetic orbital

3.1.1 Observabila moment cinetic orbital

În mecanica clasică, momentul cinetic orbital se defineşte prin relaţia:

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}, \tag{3.1}$$

unde $\vec{r}$ este raza vectoare a punctului în care se află particula de impuls $\vec{p}$, faţă de un punct fix pe care îl alegem drept origine. Ataşând operatori coordonatelor şi componentelor impulsului, vom introduce *operatorul moment cinetic orbital* ca fiind

$$\hat{\vec{L}} = \vec{r} \times \hat{\vec{p}} = \frac{\hbar}{i} \vec{r} \times \nabla \,. \tag{3.2}$$

Componentele $\left\{\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z\right\}$, având expresiile

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= y\hat{p}_z - z\hat{p}_y\,; \\ \hat{L}_y &= z\hat{p}_x - x\hat{p}_z\,; \\ \hat{L}_z &= x\hat{p}_y - y\hat{p}_z\,, \end{aligned} \tag{3.3}$$

sunt operatori hermitici, deoarece sunt compuse din operatori hermitici ce comută între ei, prin operaţii de adunare şi înmulţire (vezi teorema 1, din Capitolul

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

2). Adăugăm componentelor (3.3) observabila pătratul momentului cinetic orbital, definită ca

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2, \tag{3.4}$$

şi vom încerca să stabilim relaţiile de comutare la care se supun aceşti operatori. Utilizând proprietăţile comutatorilor (2.44) şi relaţiile de comutare (2.46, 48), rezultă imediat relaţia

$$\begin{aligned}\left[\hat{L}_x\,,\,\hat{L}_y\right] &= \left[y\,\hat{p}_z - z\,\hat{p}_y\,,\,z\,\hat{p}_x - x\,\hat{p}_z\right] = \\ &= y\,\hat{p}_x\,[\hat{p}_z\,,\,z] + x\,\hat{p}_y\,[z\,,\,\hat{p}_z] = i\,\hbar\,(x\,\hat{p}_y - y\,\hat{p}_x) = i\hbar\,\hat{L}_z\,,\end{aligned}$$

care, împreună cu celelalte două, obţinute prin permutări circulare, pot fi sistematizate sub forma

$$\left[\hat{L}_i\,,\,\hat{L}_j\right] = i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{L}_k\,,\quad i,j,k = \overline{1,3}\,, \tag{3.5}$$

unde ε_{ijk} este tensorul Levi–Civita[1]. Relaţiile (3.5) ne conduc la concluzia că operatorul $\hat{L}^2$ comută cu cele trei componente ale momentului cinetic, deoarece

$$\begin{aligned}\left[\hat{L}^2\,,\,\hat{L}_x\right] &= \left[\hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2\,,\,\hat{L}_x\right] = \left[\hat{L}_y^2\,,\,\hat{L}_x\right] + \left[\hat{L}_z^2\,,\,\hat{L}_x\right] = \\ &= \hat{L}_y\left[\hat{L}_y\,,\,\hat{L}_x\right] + \left[\hat{L}_y\,,\,\hat{L}_x\right]\hat{L}_y + \hat{L}_z\left[\hat{L}_z\,,\,\hat{L}_x\right] + \left[\hat{L}_z\,,\,\hat{L}_x\right]\hat{L}_z = \\ &= i\hbar\left(-\hat{L}_y\,\hat{L}_z - \hat{L}_z\,\hat{L}_y + \hat{L}_z\,\hat{L}_y + \hat{L}_y\,\hat{L}_z\right) = 0\,,\end{aligned}$$

deci

$$\left[\hat{L}^2\,,\,\hat{L}_x\right] = \left[\hat{L}^2\,,\,\hat{L}_y\right] = \left[\hat{L}^2\,,\,\hat{L}_z\right] = 0\,, \tag{3.6}$$

motiv pentru care, după cum vom vedea în ultimul paragraf al acestui capitol, operatorul $\hat{L}^2$ va juca un rol deosebit în construirea reprezentărilor. Subliniem faptul că relaţiile (3.6) rezultă exclusiv din (3.5), fără să se apeleze la definiţia (3.2). Deoarece operatorii care nu comută nu pot avea un set complet de funcţii proprii, relaţiile de comutare (3.5) şi (3.6) evidenţiază faptul că doar *o componentă* a lui $\vec{\hat{L}}$ şi $\hat{L}^2$ pot fi simultan în reprezentare proprie. În mod uzual, se aleg operatorii $\hat{L}_z$ şi $\hat{L}^2$.

[1] ε_{ijk} este complet antisimetric şi ε_{123}=1

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

De multe ori, în locul operatorilor $\left\{\hat{L}_x, \hat{L}_y, \hat{L}_z\right\}$ se foloseşte $\hat{L}_z$ împreună cu operatorii

$$\begin{aligned} \hat{L}_+ &= \hat{L}_x + i\hat{L}_y\,; \\ \hat{L}_- &= \hat{L}_x - i\hat{L}_y\,, \end{aligned} \tag{3.7}$$

având proprietatea evidentă

$$\hat{L}_+^\dagger = \hat{L}_-\ ;\ \hat{L}_-^\dagger = \hat{L}_+\,. \tag{3.8}$$

Ca şi în cazul precedent, adăugăm operatorul $\hat{L}^2$, exprimat acum sub forma

$$\hat{L}^2 = \frac{1}{2}\left(\hat{L}_+\hat{L}_- + \hat{L}_-\hat{L}_+\right) + \hat{L}_z^2, \tag{3.9}$$

şi putem verifica imediat relaţiile de comutatori:

$$\begin{aligned} \left[\hat{L}_z\,, \hat{L}_\pm\right] &= \pm\hbar\hat{L}_\pm\,; \\ \left[\hat{L}_+\,, \hat{L}_-\right] &= 2\hbar\hat{L}_z \end{aligned} \tag{3.10}$$

şi

$$\begin{aligned} \left[\hat{L}^2\,, \hat{L}_\pm\right] &= 0\,; \\ \left[\hat{L}^2\,, \hat{L}_z\right] &= 0\,, \end{aligned} \tag{3.11}$$

care înlocuiesc pe (3.5) şi (3.6).

3.1.2 Observabila moment cinetic în coordonate sferice

Metrica lui $\mathbf{R}^3$, în coordonate sferice, fiind

$$ds^2 = r^2(d\theta)^2 + r^2\sin^2\theta(d\varphi)^2 + (dr)^2\,, \tag{3.12}$$

introducem, din geometria diferenţială, următoarele elemente [13]:

- 1-formele bazei duale

$$\omega^1 = r\,d\theta\,,\ \ \omega^2 = r\sin\theta\,d\varphi\,,\ \ \omega^3 = dr \tag{3.13}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

- şi versorii triadului drept

$$\vec{e}_1 = \frac{1}{r}\,\partial_\theta\,,\quad \vec{e}_2 = \frac{1}{r\sin\theta}\,\partial_\varphi\,,\quad \vec{e}_3 = \partial_r\,, \tag{3.14}$$

satisfăcând "contracţia de dualitate"

$$\langle \omega^a\,,\, e_b\rangle = \omega^a_{\cdot i}\, e_b^{\cdot i} = \delta^a_b\,, \tag{3.15}$$

unde

$$\omega^a = \omega^a_{\cdot i}\, dx^i\,,\quad e_a = e_a^{\cdot i}\,\partial_i \tag{3.16}$$

exprimă cele două baze considerate în raport cu bazele canonice reciproc duale $\{dx^i\}$ şi $\{\partial_i\}$. Definiţia momentului cinetic (3.2), cu $\vec{r} = r\,\vec{e}_3$ şi

$$\nabla = \nabla^a\,\vec{e}_a = \delta^{ab}\,\nabla_b\,\vec{e}_b\,, \tag{3.17}$$

unde

$$\nabla_1 = \frac{1}{r}\,\partial_\theta\,,\quad \nabla_2 = \frac{1}{r\sin\theta}\,\partial_\varphi\,,\quad \nabla_3 = \partial_r\,, \tag{3.18}$$

devine astfel

$$\hat{\vec{L}} = \frac{\hbar}{i}\,r\,\vec{e}_3 \times \left(\nabla^A\vec{e}_A + \nabla^3\vec{e}_3\right) = \frac{\hbar}{i}\,r\,\varepsilon^{3AB}\,(\nabla_A)\,e_B^i\,\partial_i\,. \tag{3.19}$$

Pentru $\varepsilon^{3AB} = \varepsilon^{AB}$, cu $\varepsilon^{12} = -\varepsilon^{21} = 1$, rezultă componenta (i) a momentului cinetic, în reper cartezian, exprimată în coordonate sferice, ca fiind

$$\hat{L}^i = \frac{\hbar}{i}\,r\,\varepsilon^{AB}\,(\nabla_A)\,e_B^i\,. \tag{3.20}$$

În vederea determinării elementelor matricei $\{e_A^i\}$, utilizăm relaţia de transformare a coordonatelor

$$\begin{aligned} x &= r\,\sin\theta\,\cos\varphi \\ y &= r\,\sin\theta\,\sin\varphi \\ z &= r\,\cos\theta\,, \end{aligned} \tag{3.21}$$

care, prin diferenţiere, ne conduce la

$$\begin{aligned} dx^1 &= \sin\theta\cos\varphi\,dr + r\cos\theta\cos\varphi\,d\theta - r\sin\theta\sin\varphi\,d\varphi \\ dx^2 &= \sin\theta\sin\varphi\,dr + r\cos\theta\sin\varphi\,d\theta + r\sin\theta\cos\varphi\,d\varphi \\ dx^3 &= \cos\theta\,dr - r\sin\theta\,d\theta\,, \end{aligned} \tag{3.22}$$

BCUIASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

unde refacem elementele bazei duale $\{\omega^a\}_{a=\overline{1,3}}$, adică

$$\begin{aligned} dx^1 &= e_a^1\,\omega^a = \cos\theta\cos\varphi\,\omega^1 - \sin\varphi\,\omega^2 + \sin\theta\cos\varphi\,\omega^3 \\ dx^2 &= e_a^2\,\omega^a = \cos\theta\sin\varphi\,\omega^1 + \cos\varphi\,\omega^2 + \sin\theta\sin\varphi\,\omega^3 \\ dx^3 &= e_a^3\,\omega^a = -\sin\theta\,\omega^1 + \cos\theta\,\omega^3\,. \end{aligned} \tag{3.23}$$

Revenind la expresia (3.20) a componentelor $\hat{L}^i$, adică

$$\begin{aligned} \hat{L}_1 &= \frac{\hbar}{i}\,r\left[(\nabla_1)\,e_2^1 - (\nabla_2)\,e_1^1\right] \\ \hat{L}_2 &= \frac{\hbar}{i}\,r\left[(\nabla_1)\,e_2^2 - (\nabla_2)\,e_1^2\right] \\ \hat{L}_3 &= \frac{\hbar}{i}\,r\left[(\nabla_1)\,e_2^3 - (\nabla_2)\,e_1^3\right], \end{aligned} \tag{3.24}$$

înlocuim elementele e_a^i din (3.23) şi obţinem

$$\begin{aligned} &\text{(a)}\quad \hat{L}_1 = \frac{\hbar}{i}\left[-\sin\varphi\,\partial_\theta - \operatorname{ctg}\theta\cos\varphi\,\partial_\varphi\right] \\ &\text{(b)}\quad \hat{L}_2 = \frac{\hbar}{i}\left[\cos\varphi\,\partial_\theta - \operatorname{ctg}\theta\sin\varphi\,\partial_\varphi\right] \\ &\text{(c)}\quad \hat{L}_3 = \frac{\hbar}{i}\left[\partial_\varphi\right]. \end{aligned} \tag{3.25}$$

Cu aceste componente, operatorii $\hat{L}_\pm$, definiţi prin (3.7), devin

$$\begin{aligned} &\text{(a)}\quad \hat{L}_+ = L_1 + iL_2 = \hbar\,e^{i\varphi}\left[\partial_\theta + i\operatorname{ctg}\theta\,\partial_\varphi\right] \\ &\text{(b)}\quad \hat{L}_- = L_1 - iL_2 = -\hbar\,e^{-i\varphi}\left[\partial_\theta - i\operatorname{ctg}\theta\,\partial_\varphi\right] \end{aligned} \tag{3.26}$$

şi urmează să verificăm valabilitatea algebrei (3.10). Într-adevăr, avem relaţia

$$\begin{aligned} [L_+, L_-] &= \hbar\,e^{i\varphi}\left(\partial_\theta + i\operatorname{ctg}\theta\,\partial_\varphi\right)\left[-\hbar\,e^{-i\varphi}\left(\partial_\theta - i\operatorname{ctg}\theta\,\partial_\varphi\right)\right] + \\ &\quad + \hbar\,e^{-i\varphi}\left(\partial_\theta - i\operatorname{ctg}\theta\,\partial_\varphi\right)\left[\hbar\,e^{i\varphi}\left(\partial_\theta + i\operatorname{ctg}\theta\,\partial_\varphi\right)\right] \end{aligned} \tag{3.27}$$

care, aplicată unei funcţii ψ, ne conduce la

$$\begin{aligned} [L_+, L_-]\,\psi &= -\hbar^2\,e^{i\varphi}\left[e^{-i\varphi}\left(\psi_{,\theta} - i\operatorname{ctg}\theta\,\psi_{,\varphi}\right)\right]_{,\theta} - \\ &\quad - i\hbar^2\,e^{i\varphi}\operatorname{ctg}\theta\left[e^{-i\varphi}\left(\psi_{,\theta} - i\operatorname{ctg}\theta\,\psi_{,\varphi}\right)\right]_{,\varphi} + \\ &\quad + \hbar^2\,e^{-i\varphi}\left[e^{i\varphi}\left(\psi_{,\theta} + i\operatorname{ctg}\theta\,\psi_{,\varphi}\right)\right]_{,\theta} - \\ &\quad - i\hbar^2\,e^{-i\varphi}\operatorname{ctg}\theta\left[e^{i\varphi}\left(\psi_{,\theta} + i\operatorname{ctg}\theta\,\psi_{,\varphi}\right)\right]_{,\varphi} \end{aligned}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

sau, după efectuarea calculelor şi reducerea termenilor, la relaţia de comutatori

$$\begin{aligned}[L_+, L_-]\psi &= -\frac{2i\hbar^2}{\sin^2\theta}\psi_{,\varphi} + 2i\hbar^2 \operatorname{ctg}^2\theta\,\psi_{,\varphi} = \\ &= \frac{2\hbar^2}{i}\,\frac{1-\cos^2\theta}{\sin^2\theta}\psi_{,\varphi} = 2\hbar\frac{\hbar}{i}\partial_\varphi\psi = \\ &= 2\hbar\hat{L}_3\,, \end{aligned} \tag{3.28}$$

unde am utilizat (3.25.c).

În final, pentru a găsi expresia operatorului $\hat{L}^2$ definit prin relaţia (3.4) sau, cu ajutorul operatorilor $\hat{L}_+$, $\hat{L}_-$, $\hat{L}_3$, prin relaţia

$$\begin{aligned} L^2 &= \frac{1}{4}(L_+ + L_-)^2 - \frac{1}{4}(L_+ - L_-)^2 + L_3^2 = \\ &= \frac{1}{2}(L_+L_- + L_-L_+) + L_3^2\,, \end{aligned} \tag{3.29}$$

trebuie să evaluăm, mai întâi, anticomutatorul operatorilor L_+ şi L_-, adică

$$\begin{aligned}\{L_+, L_-\}\psi &= -\hbar^2\Bigg[\psi_{,\theta\theta} \underbrace{+\frac{i}{\sin^2\theta}\psi_{,\varphi}}_{(1)} \underbrace{-i\operatorname{ctg}\theta\,\psi_{,\varphi\theta}}_{(2)}\Bigg] - \\ &\quad -\hbar^2\operatorname{ctg}\theta\Bigg[\psi_{,\theta}\underbrace{-i\operatorname{ctg}\theta\,\psi_{,\varphi}}_{(3)}\Bigg] - i\hbar^2\operatorname{ctg}\theta\Bigg[\underbrace{\psi_{,\theta\varphi}}_{(4)} - i\operatorname{ctg}\theta\,\psi_{,\varphi\varphi}\Bigg] - \\ &\quad -\hbar^2\Bigg[\psi_{,\theta\theta}\underbrace{-\frac{i}{\sin^2\theta}\psi_{,\varphi}}_{(1)}\underbrace{+i\operatorname{ctg}\theta\,\psi_{,\varphi\theta}}_{(2)}\Bigg] - \\ &\quad -\hbar^2\operatorname{ctg}\theta\Bigg[\psi_{,\theta}\underbrace{+i\operatorname{ctg}\theta\,\psi_{,\varphi}}_{(3)}\Bigg] + i\hbar^2\operatorname{ctg}\theta\Bigg[\underbrace{\psi_{,\theta\varphi}}_{(4)} + i\operatorname{ctg}\theta\,\psi_{,\varphi\varphi}\Bigg]. \end{aligned}$$

Simplificăm, corespunzător, termenii subliniaţi, şi obţinem relaţia

$$\{L_+, L_-\}\psi = -2\hbar^2\left(\psi_{,\theta\theta} + \operatorname{ctg}\theta\,\psi_{,\theta} + \operatorname{ctg}^2\theta\,\psi_{,\varphi\varphi}\right) \tag{3.30}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

care, înlocuită în (3.29), ne conduce, împreună cu $\hat{L}_3^2 = -\hbar^2 \psi_{,\varphi\varphi}$, la expresia finală a operatorului $\hat{L}^2$ în coordonate sferice:

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\partial_\theta^2 + \operatorname{ctg}\theta\, \partial_\theta + \left(\operatorname{ctg}^2\theta + 1\right) \partial_\varphi^2\right], \tag{3.31}$$

adică

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial\theta} \left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial}{\partial\varphi^2}\right]. \tag{3.32}$$

În paranteza pătrată din membrul drept al relaţiei de mai sus, am pus în evidenţă operatorul $\tilde{\Delta}$, dat de (1.119). În consecinţă, operatorul $\hat{L}^2$ poate fi exprimat în raport cu acesta ca fiind

$$\hat{L}^2 = -\hbar^2 \tilde{\Delta}\,. \tag{3.33}$$

3.1.3 Funcţiile şi valorile proprii ale momentului cinetic orbital

În ecuaţia de vectori şi valori proprii

$$\hat{L}^2 |\psi\rangle = L^2 |\psi\rangle \tag{3.34}$$

înlocuim expresia (3.33) a operatorului $\hat{L}^2$ şi obţinem

$$\tilde{\Delta} |\psi\rangle = -\frac{L^2}{\hbar^2} |\psi\rangle\,. \tag{3.35}$$

Comparând (3.35) cu ecuaţia diferenţială a funcţiilor sferice (vezi Anexa **A.3**),

$$\tilde{\Delta} Y_l^m(\theta,\varphi) + l(l+1)\, Y_l^m(\theta,\varphi) = 0\,, \tag{3.36}$$

punem în evidenţă atât *funcţiile proprii* ale lui $\hat{L}^2$, adică

$$|\psi\rangle = Y_l^m(\theta,\varphi) \equiv |l,m\rangle\,, \tag{3.37}$$

cât şi *valorile proprii* corespunzătoare

$$L^2 = \hbar^2 l(l+1)\,, \tag{3.38}$$

cu $l = 0, 1, 2, \ldots$ Impunând ca Y_l^m, de forma (1.121), asupra căruia operatorul $\hat{L}_z$ (care comută cu $\hat{L}^2$) acţionează după regula

$$\hat{L}_z\, Y_l^m(\theta,\varphi) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial\varphi} P_l^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi} = m\hbar\, Y_l^m(\theta,\varphi)\,, \tag{3.39}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

să satisfacă şi ecuaţia

$$\hat{L}_z Y_l^m(\theta,\varphi) = L_z Y_l^m(\theta,\varphi)\,, \tag{3.40}$$

obţinem *ecuaţia de vectori şi valori proprii* corespunzătoare operatorului $\hat{L}_z$ sub forma

$$\hat{L}_z Y_l^m(\theta,\varphi) = m\hbar Y_l^m(\theta,\varphi)\,, \tag{3.41}$$

cu $m = -l, -l+1, \ldots, -1, 0, 1, \ldots, l-1, l$.

Sistematizând rezultatele obţinute şi utilizând notaţia (3.37), putem scrie ecuaţiile de vectori şi valori proprii satisfăcute de operatorii $\hat{L}^2$ şi $\hat{L}_z$ în formă finală ca fiind:

$$\hat{L}^2 |l,m\rangle = \hbar^2 l(l+1)\,|l,m\rangle \tag{3.42}$$

$$\hat{L}_z |l,m\rangle = \hbar m\,|l,m\rangle\,. \tag{3.43}$$

La acestea, vom adăuga – fără demonstraţie – relaţiile ce exprimă acţiunea operatorilor $\hat{L}_\pm$ asupra vectorilor proprii ai operatorilor $\hat{L}^2$ şi $\hat{L}_z$, anume:

$$\hat{L}_+ |l,m\rangle = \hbar\sqrt{(l-m)(l+m+1)}\,|l,m+1\rangle\,; \tag{3.44}$$

$$\hat{L}_- |l,m\rangle = \hbar\sqrt{(l+m)(l-m+1)}\,|l,m-1\rangle\,, \tag{3.45}$$

la care vom reveni la studiul momentului cinetic total.

3.2 Momentul cinetic propriu (spinul)

3.2.1 Spinul electronului

În 1925, Uhlenbeck şi Goudsmith au emis următoarea ipoteză, care le poartă numele, cu scopul explicării structurii fine a spectrelor: *Electronul are un moment cinetic propriu, $\vec{S}$, şi un moment magnetic propriu, $\vec{\mu}$, independente de mişcarea sa orbitală şi ale căror proiecţii pe o axă privilegiată (de exemplu, Oz) pot lua câte două valori proprii şi anume*

$$S_z = \pm\frac{\hbar}{2}\ ;\ \mu_z = \pm\frac{e\hbar}{2m}\,. \tag{3.46}$$

Prin analogie cu cele discutate în paragraful anterior, vom scrie următoarea relaţie de cuantificare

$$S_z = m_s\hbar\,,\ \text{cu}\ m_s = \pm\frac{1}{2}\,, \tag{3.47}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

care arată că *electronul are spinul* $\frac{1}{2}$.

În cele ce urmează, vom expune *teoria semiempirică a spinului* 1/2, elaborată de W. Pauli, în 1927, şi care se bazează pe teoria momentului cinetic orbital – prezentată în paragraful anterior – şi pe ipoteza empirică a lui Uhlenbeck şi Goudsmith.

Datorită faptului că spinul este un moment cinetic, observabilele $\hat{\vec{S}}$ şi

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 \tag{3.48}$$

trebuie să satisfacă regulile interne de comutare la care se supun componentele momentului cinetic şi pătratul acestuia. Astfel, relaţiile (3.5) şi (3.6) devin

$$\begin{aligned} \left[\hat{S}_i\,,\,\hat{S}_j\right] &= i\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{S}_k\,,\ i,j,k=\overline{1,3}\,,\\ \left[\hat{S}^2\,,\,\hat{\vec{S}}\right] &= 0\,, \end{aligned} \tag{3.49}$$

iar echivalentele lor, (3.10) şi (3.11), capătă forma

$$\begin{aligned} \left[\hat{S}_z\,,\,\hat{S}_\pm\right] &= \pm\hbar\,\hat{S}_\pm\,;\\ \left[\hat{S}_+\,,\,\hat{S}_-\right] &= 2\hbar\,\hat{S}_z\,;\\ \left[\hat{S}^2\,,\,\hat{S}_\pm\right] &= \left[\hat{S}^2\,,\,\hat{S}_z\right] = 0\,, \end{aligned} \tag{3.50}$$

unde am introdus notaţiile

$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\,\hat{S}_y\,. \tag{3.51}$$

Pentru simplificarea calculelor, considerăm

$$\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\,\vec{\sigma} \tag{3.52}$$

şi aducem relaţiile (3.49) şi (3.50) la forma

$$\begin{aligned} [\sigma_i\,,\,\sigma_j] &= 2i\,\varepsilon_{ijk}\,\sigma_k\,,\ i,j,k=\overline{1,3}\,;\\ \left[\sigma^2\,,\,\vec{\sigma}\right] &= 0 \end{aligned} \tag{3.53}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi, respectiv,

$$\begin{aligned}
&[\sigma_z\,,\,\sigma_\pm] = \pm 2\sigma_\pm;\\
&[\sigma_+\,,\,\sigma_-] = 4\sigma_z\,;\\
&\left[\sigma^2\,,\,\sigma_\pm\right] = \left[\sigma^2\,,\,\sigma_z\right] = 0\,,
\end{aligned} \tag{3.54}$$

unde

$$\sigma_\pm = \sigma_x \pm i\sigma_y \tag{3.55}$$

şi $\sigma^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2$.

Lucrând direct în reprezentare matriceală, ipoteza (3.46) impune următoarea matrice diagonală:

$$\hat{S}_z = \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{\hbar}{2} \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{3.56}$$

adică, ţinând cont de (3.52),

$$\sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{3.57}$$

Vom deduce expresiile concrete ale matricelor $\sigma_\pm$. Astfel, presupunând pentru $\sigma_\pm$ două matrice 2×2 (conjugate hermitic) de forma

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \;;\; \sigma_- = \begin{pmatrix} a_{11}^* & a_{21}^* \\ a_{12}^* & a_{22}^* \end{pmatrix}, \tag{3.58}$$

explicităm regula de comutare

$$[\sigma_z\,,\,\sigma_+] = 2\sigma_+\,,$$

adică

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} =$$
$$= 2\begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ -a_{21} & 0 \end{pmatrix} = 2\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix},$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi obţinem următoarea relaţie între elementele matricelor $\sigma_{\pm}$:

$$a_{11} = a_{21} = a_{22} = 0\,.$$

Notând $a_{12} \equiv a$, rezultă pentru matricele $\sigma_{\pm}$ expresiile deosebit de simple

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & a \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \;;\; \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ a^* & 0 \end{pmatrix} \tag{3.59}$$

cărora le impunem regula de comutare

$$[\sigma_+\,,\,\sigma_-] = 4\sigma_z\,,$$

de unde rezultă relaţia $a\,a^* = 4$. Neavând alte condiţii, vom admite că a *este real* şi pozitiv, adică rezultă $a = 2$. Expresiile concrete ale matricelor $\sigma_{\pm}$, adică

$$\sigma_+ = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \;;\; \sigma_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}, \tag{3.60}$$

ne permit să scriem matricele σ_x şi σ_y ca fiind

$$\sigma_x = \frac{1}{2}(\sigma_+ + \sigma_-) \;;\; \sigma_y = \frac{1}{2i}(\sigma_+ - \sigma_-)\,, \tag{3.61}$$

la care adăugăm pe σ_z, dat de (3.57), şi obţinem matricele

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \;;\; \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \;;\; \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{3.62}$$

denumite *matricele Pauli.* În sfârşit, printr-un calcul elementar, se poate verifica următoarea relaţie satisfăcută de matricele (3.62)

$$\sigma_i\,\sigma_j + \sigma_j\,\sigma_i = 2\,\delta_{ij}\,I \;\;;\;\; i,j = 1,2,3 \tag{3.63}$$

care, pentru $i = j$, se reduce la

$$\sigma_i^2 = I\,,\;\; i = 1,2,3\,, \tag{3.64}$$

unde I este matricea unitate 2×2.

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Cu ajutorul matricelor (3.62), observabilele moment cinetic propriu şi moment magnetic propriu, asociate electronului, introduse prin ipoteza (3.46), pot fi scrise sub forma

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad \hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\vec{\sigma}\,; \\ &\text{b)} \quad \hat{\vec{\mu}} = \frac{e\hbar}{2m}\vec{\sigma}\,, \end{aligned} \tag{3.65}$$

de unde rezultă valabilitatea ipotezei (3.47), adică

$$S_z = m_s\hbar\,, \text{ cu } m_s = \pm\frac{1}{2},$$

confirmând faptul că *electronul are*, într-adevăr, *spinul* $1/2$. La aceeaşi concluzie ne conduce şi operatorul

$$\hat{S}^2 = \frac{\hbar^2}{4}\left(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2\right) = \frac{3\hbar^2}{4}I\,, \tag{3.66}$$

a cărui valoare proprie, $S^2 = \frac{3\hbar^2}{4}$, este de tipul (3.38), adică

$$S^2 = \hbar^2 s(s+1)\,, \tag{3.67}$$

deci, din nou, $s = \frac{1}{2}$.

3.2.2 Spaţiul spin

Operatorii $\hat{\vec{S}}$, respectiv $\vec{\sigma}$, acţionează într-un spaţiu abstract bidimensional, pe care îl vom nota cu $\mathcal{S}_2$. Alegând ca bază chiar vectorii proprii ai operatorului σ_z, notaţi cu $|\xi\rangle$ şi $|\eta\rangle$, pentru care ecuaţiile de vectori şi valori proprii au forma concretă

$$\begin{aligned} \sigma_z|\xi\rangle &= |\xi\rangle\,; \\ \sigma_z|\eta\rangle &= -|\eta\rangle\,, \end{aligned} \tag{3.68}$$

rezultă că orice element al spaţiului, $|\chi\rangle \in \mathcal{S}_2$, este o combinaţie de tipul

$$|\chi\rangle = a|\xi\rangle + b|\eta\rangle\,, \tag{3.69}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

cu $a, b \in \mathbf{C}$. În această bază, matricele asociate vectorilor din $\mathcal{S}_2$, obţinute prin aplicarea relaţiilor (2.142), sunt de forma

$$|\xi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \langle\xi|\xi\rangle \\ \langle\eta|\xi\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix};$$

$$|\eta\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \langle\xi|\eta\rangle \\ \langle\eta|\eta\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}; \tag{3.70}$$

$$|\chi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \langle\xi|\chi\rangle \\ \langle\eta|\chi\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}. \tag{3.71}$$

Bazei duale,

$$\begin{aligned} \langle\xi| &= (|\xi\rangle)^\dagger \\ \langle\eta| &= (|\eta\rangle)^\dagger, \end{aligned} \tag{3.72}$$

îi vor corespunde matricele linie

$$\begin{aligned} \langle\xi| &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}; \\ \langle\eta| &\rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{3.73}$$

Pentru oricare doi vectori, $|\chi\rangle$ şi $|\tau\rangle$, cărora le sunt asociaţi dualii

$$\langle\chi| \rightarrow \begin{pmatrix} a^* & b^* \end{pmatrix} \tag{3.74}$$

şi

$$\langle\tau| \rightarrow \begin{pmatrix} c^* & d^* \end{pmatrix}, \tag{3.75}$$

produsul scalar se calculează cu ajutorul formulei (2.148), adică

$$\langle\tau|\chi\rangle = \begin{pmatrix} c^* & d^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = c^* a + d^* b. \tag{3.76}$$

În sfârşit, expresiile matriceale (3.62) şi (3.70) ne permit să deducem următoarele relaţii:

$$\begin{aligned} \sigma_x |\xi\rangle &= |\eta\rangle \;\; ; \;\; \sigma_x |\eta\rangle = |\xi\rangle \\ \sigma_y |\xi\rangle &= i\,|\eta\rangle \;\; ; \;\; \sigma_y |\eta\rangle = -i\,|\xi\rangle \\ \sigma_z |\xi\rangle &= |\xi\rangle \;\; ; \;\; \sigma_z |\eta\rangle = -|\eta\rangle, \end{aligned} \tag{3.77}$$

exprimând acţiunea operatorilor $\vec{\sigma}$ asupra vectorilor bazei.

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

3.2.3 Simetrii interne

Transformările care acţionează asupra funcţiilor de undă, *lăsând neschimbate coordonatele spaţio-temporale*, poartă numele de *transformări interne*. Dintre acestea, *transformările unitare*, păstrând invarianţa normei şi a produsului scalar, sunt deosebit de importante pentru teoriile de câmp. Pe lângă transformările uzuale de fază,

$$\phi(x) \to \phi'(x) = e^{-i\alpha}\phi(x)\,, \tag{3.78}$$

ce formează grupul abelian uniparametric $U(1)$, matricele unitare $U_{N\times N}$, satisfăcând $U^\dagger U = 1$ şi $\det U = 1$, alcătuiesc *grupul special unitar* $SU(N)$. Evident, condiţiile de mai sus limitează numărul parametrilor prin a căror variaţie continuă (finită) sunt generate elementele grupului. Astfel, în loc de $2N^2$, există $2N^2 - N^2 - 1 = N^2 - 1$ parametri reali independenţi, numiţi *parametri esenţiali*.

După cum am văzut în paragraful 2.2, dedicat comutatorilor, prin scrierea elementelor $U \in SU(N)$ sub forma (2.31), adică $U = \exp[-iX]$, se face trecerea de la grupul Lie $SU(N)$ la algebra Lie $\mathcal{SU}(N)$ asociată acestuia, unde $X \in \mathcal{SU}(N)$ se exprimă ca o combinaţie liniară a generatorilor $\{X_a\}_{a=\overline{1,n}}$ (al căror număr este egal cu numărul parametrilor esenţiali ai grupului), prin $X = \theta^a X_a$, cu $a = \overline{1,n}$; $n = N^2 - 1$. Generatorii $\{X^a\}_{a=\overline{1,n}}$ satisfac relaţiile de comutatori

$$\left[X^a\,,\, X^b\right] = i\, f^{abc} X_c\,,$$

unde *constantele de structură*, f^{abc}, sunt reale şi complet antisimetrice. Pentru transformări infinitezimale, elementele grupului Lie (fiind funcţii analitice de parametrii infinitezimali) se scriu ca dezvoltări în serie de tipul (2.32).

O *reprezentare* a grupului Lie $SU(N)$ asociază fiecărui element, $U \in SU(N)$, un operator, $D(U)$, satisfăcând axiomele definiţiei 3 din capitolul anterior, adică:

(i) $D(U_1 \cdot U_2) = D(U_1) \cdot D(U_2)$;
(ii) $D(e) = 1$ (operator unitar).

De asemenea, prin (2.34), adică

$$D(U) = \exp\left[-i\theta^a T(X_a)\right], \tag{3.79}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

asociem generatorilor $\{X_a\}$ operatorii $T_a = T(X_a)$ satisfăcând algebra (2.38), adică

$$\left[T^a, T^b\right] = i f^{abc} T_c \,. \tag{3.80}$$

Un exemplu de reprezentare a unei algebre Lie este *reprezentarea adjunctă* care se defineşte prin:

$$\begin{aligned} &ad : \mathcal{S} \to \mathcal{S} \\ &ad : X \to ad\,X \\ &(ad\,X)Y = [X, Y] \,, \end{aligned} \tag{3.81}$$

unde $\mathcal{S}$ este un spaţiu liniar a cărui dimensiune, după cum rezultă din ultima dintre relaţiile (3.81), **coincide** cu dimensiunea grupului, adică $dim\,\mathcal{S} \equiv n = N^2 - 1 \equiv dim\ SU(N)$ şi, de asemenea, generatorii $T_c \equiv ad\,X_c$ vor fi chiar matricele $n \times n$ formate de elementele $(T_c)^{ab} = i f^{abc}$.

În continuare, vom prezenta succint câteva rezultate utile, cunoscute din teoria grupurilor Lie, pentru a căror demonstraţie şi detaliere recomandăm cititorului [51], acestea depăşind cu mult cadrul prezentei lucrări. Astfel, în construirea reprezentărilor unei algebre sunt importanţi operatorii care comută cu toţi generatorii acesteia. Din teoria grupurilor Lie, se cunoaşte că orice algebră Lie semisimplă, asociată unui grup Lie compact, admite mai multe subalgebre abeliene maximale, numite *subalgebre Cartan*, notate cu $\mathcal{C}$, a căror dimensiune comună poartă numele de *rangul algebrei Lie*. Astfel, pentru algebra n dimensională $\mathcal{SU}(N)$, cu $n = N^2 - 1$, rangul este $r = N - 1$. În reprezentarea adjunctă (3.81), operatorii asociaţi generatorilor $\{h_A\}_{A=\overline{1,r}}$ ai algebrei Cartan sunt simultan diagonalizabili, satisfăcând relaţiile de vectori şi valori proprii

$$(ad\,h_A)e_\alpha = \alpha_A\, e_\alpha \tag{3.82}$$

sau, ţinând cont de (3.81),

$$[h_A, e_\alpha] = \alpha_A e_\alpha \,. \tag{3.83}$$

Ansamblurile $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_r)$, în număr de $n - r$, poartă numele de *rădăcini*, iar e_α sunt denumiţi *vectori rădăcină*. Extindem baza algebrei Cartan, $\{h_A\}_{A=\overline{1,r}}$, adăugând cei $n - r$ vectori rădăcină e_α şi obţinem n vectori liniar independenţi ce formează o bază pentru algebra Lie n dimensională, cu

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

relaţiile de comutatori

$$\begin{aligned} &\text{a)}\ [h_A\,,\,h_B] = 0\,; \\ &\text{b)}\ [h_A\,,\,e_\alpha] = \alpha_A e_\alpha\,. \end{aligned} \tag{3.84}$$

În continuare, să particularizăm relaţiile de mai sus pentru cazul grupului Lie $SU(2)$, ai cărui generatori sunt proporţionali cu matricele Pauli deduse în paragraful anterior. Astfel, grupul $SU(2)$, cu $N = 2$, este caracterizat de $n = 3$ parametri infinitezimali esenţiali, $\{\theta^\mu\}_{\mu=\overline{1,3}}$, şi de trei generatori, $\{X^\mu\}_{\mu=\overline{1,3}}$, ca bază a algebrei $\mathcal{SU}(2)$ asociate, satisfăcând relaţiile de comutatori

$$[X^\mu\,,\,X^\nu] = i\,\varepsilon^{\mu\nu\gamma}X_\gamma\,. \tag{3.85}$$

Rangul $r = N - 1 = 1$ selectează trei subalgebre abeliene maximale monodimensionale, dintre care o vom alege pe cea generată de $h = X^3$, diagonalizabil în orice reprezentare.

A construi o reprezentare a algebrei $\mathcal{SU}(2)$ înseamnă să asociem generatorilor X^μ operatorii $T(X^\mu) = T^\mu$, satisfăcând, de asemenea, algebra (3.85), adică

$$[T^\mu\,,\,T^\nu] = i\,\varepsilon^{\mu\nu\gamma}T_\gamma\,. \tag{3.86}$$

Fiecare din cei $n - r = 2$ vectori rădăcină, fiind un element al algebrei, se scrie ca o combinaţie

$$e = C_1T_1 + C_2T_2 + C_3T_3 \tag{3.87}$$

şi impunând (3.84.b), adică $[T_3\,,\,e] = \alpha\,e$, şi (3.85), punem în evidenţă următoarea relaţie între constantele arbitrare:

$$C_2 = i\alpha C_1\,, \tag{3.88}$$

precum şi rădăcinile

$$\alpha = \pm 1\,. \tag{3.89}$$

În concluzie, luând $C_1 = 1$, cei doi vectori rădăcină

$$\begin{aligned} e_+ \equiv T_+ &= T_1 + iT_2\,,\ \text{pentru}\ \alpha = 1\,; \\ e_- \equiv T_- &= T_1 - iT_2\,,\ \text{pentru}\ \alpha = -1\,, \end{aligned} \tag{3.90}$$

împreună cu $h = T_3$ formează o bază pentru algebra $\mathcal{SU}(2)$, cu relaţiile de comutatori

$$[T_3\,,\,T_+] = T_+\ ;\ [T_3\,,\,T_-] = -T_-\ ;\ [T_+\,,\,T_-] = 2T_3\,. \tag{3.91}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Pentru $\hbar = 1$, constatăm o perfectă similaritate a relaţiilor (3.91) cu relaţiile de comutatori (3.10), de la momentul cinetic orbital, şi cu relaţiile (3.50), satisfăcute de matricele de spin. Aceasta exprimă izomorfismul algebrelor $\mathcal{O}(3)$ şi $\mathcal{SU}(2)$, generate de momentele cinetice $\{L_i\}_{i=\overline{1,3}}$ şi, respectiv, $\{S_i\}_{i=\overline{1,3}}$. Se observă că generatorul subalgebrei Cartan, T_3, va fi, în cazul celor două algebre, $T_3 = L_z$ şi respectiv $T_3 = S_z$, acestuia fiindu-i asociată, în orice reprezentare, o matrice diagonală. În plus, vectorilor rădăcină $e_\pm$ le vor corespunde operatorii $L_\pm$, respectiv $S_\pm$. Anticipăm faptul că, în ultimul paragraf al acestui capitol, vom construi matricele asociate generatorilor algebrei $\mathcal{SU}(2)$, pentru reprezentări de diferite dimensiuni.

3.2.4 Ecuaţia lui Pauli

Considerăm că electronul este descris de un hamiltonian de forma

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r}) - \hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}\,, \quad \text{cu } \hat{\vec{\mu}} \overset{(3.65.b)}{=} \frac{e\hbar}{2m}\,\vec{\sigma}\,, \tag{3.92}$$

unde ultimul termen reprezintă interacţiunea momentului magnetic propriu, $\vec{\mu}$, cu un câmp magnetic exterior, de inducţie $\vec{B}$. Construim un spaţiu funcţional în care să acţioneze atât operatorii $\hat{\vec{p}}$ şi $V(\vec{r})$, cât şi $\vec{\sigma}$. Considerând $\{|i\rangle\}$ ca baza lui $\mathcal{L}^2$ şi $\{|\xi_\alpha\rangle\}$, cu $\alpha = 1, 2$, ca baza lui $\mathcal{S}_2$, formăm cuplurile (a nu se confunda cu produsul scalar)

$$(|i\rangle, |\xi_\alpha\rangle) \equiv |i, \xi_\alpha\rangle\,, \quad \text{cu} \begin{cases} i = 1, 2, 3 \ldots \\ \alpha = 1, 2\,, \end{cases} \tag{3.93}$$

definind astfel o nouă bază, $\{|i, \xi_\alpha\rangle\}$, care generează un *nou spaţiu* funcţional, notat cu $\mathcal{L}^2 \otimes \mathcal{S}_2$ şi numit produsul tensorial al spaţiilor $\mathcal{L}^2$ şi $\mathcal{S}_2$. În baza următoarelor definiţii, acesta poate fi organizat ca un spaţiu Hilbert.

Definiţia 8 *Înmulţirea cu un scalar λ se defineşte prin:*

$$\lambda|i, \xi_\alpha\rangle = (\lambda|i\rangle\,, |\xi_\alpha\rangle) = (|i\rangle\,, \lambda|\xi_\alpha\rangle)\,. \tag{3.94}$$

Definiţia 9 *Produsul scalar a doi vectori ai bazei este dat de relaţia:*

$$\langle k, \xi_\beta | i, \xi_\alpha\rangle = \langle k|i\rangle\langle\xi_\beta|\xi_\alpha\rangle = \delta_{ki}\,\delta_{\beta\alpha}\,. \tag{3.95}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Un vector $|\psi\rangle \in \mathcal{L}^2 \otimes \mathcal{S}_2$ se exprimă ca următoarea combinaţie de vectori ai bazei:

$$|\psi\rangle = \sum_{i,\alpha} c_{i\alpha} |i, \xi_\alpha\rangle \,, \tag{3.96}$$

iar pentru orice doi operatori,

$$\hat{A} : \mathcal{L}^2 \rightarrow \mathcal{L}^2 \,; \tag{3.97}$$

$$\hat{B} : \mathcal{S}_2 \rightarrow \mathcal{S}_2 \,, \tag{3.98}$$

se defineşte operatorul

$$(\hat{A}\,,\, \hat{B}) \equiv \hat{A}\hat{B} = \hat{C} : \mathcal{L}^2 \otimes \mathcal{S}_2 \rightarrow \mathcal{L}^2 \otimes \mathcal{S}_2 \,, \tag{3.99}$$

prin relaţia

$$\hat{A}\hat{B}|i, \xi_\alpha\rangle = \left(\hat{A}|i\rangle\,,\, \hat{B}|\xi_\alpha\rangle\right) . \tag{3.100}$$

Acest rezultat ne permite să observăm că operatorul hamiltonian (3.92) acţionează în $\mathcal{L}^2 \otimes \mathcal{S}_2$, înţelegând că operatorul $\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})$ este înmulţit cu operatorul identitate din $\mathcal{S}_2$, iar $-\hat{\vec{\mu}} \cdot \vec{B}$ este înmulţit cu operatorul identitate din $\mathcal{L}^2$.

Ecuaţia

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle \,, \tag{3.101}$$

cu $\hat{H}$ dat de (3.92) şi $|\psi\rangle \in \mathcal{L}^2 \otimes \mathcal{S}_2$, se numeşte *ecuaţia lui Pauli.* Separând suma din (3.96) în două părţi, adică

$$|\psi\rangle = \sum_i c_{i1}\, |i, \xi_1\rangle + \sum_i c_{i2}\, |i, \xi_2\rangle = |\psi_1, \xi_1\rangle + |\psi_2, \xi_2\rangle \,, \tag{3.102}$$

putem ataşa vectorului de stare matricea

$$|\psi\rangle \rightarrow \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \tag{3.103}$$

care ne conduce la următoarea formă explicită a ecuaţiei (3.101):

$$\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})\right] \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} - \frac{e\hbar}{2m} \vec{B} \cdot \vec{\sigma} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} . \tag{3.104}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Ţinând cont de acţiunea matricelor Pauli asupra vectorilor de stare,

$$\begin{aligned}
\sigma_1 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \psi_2 \\ \psi_1 \end{pmatrix}; \\
\sigma_2 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} -i\,\psi_2 \\ i\,\psi_1 \end{pmatrix}; \\
\sigma_3 \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \psi_1 \\ -\psi_2 \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{3.105}$$

ecuaţia (3.104), cu notaţia $B_\pm = B_x \pm i\,B_y$, se despică în următoarele două ecuaţii cuplate:

$$\begin{aligned}
\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})\right]\psi_1 - \frac{e\hbar}{2m}\left(B_-\,\psi_2 + B_z\,\psi_1\right) &= E\,\psi_1\,; \\
\left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\vec{r})\right]\psi_2 - \frac{e\hbar}{2m}\left(B_+\,\psi_1 - B_z\,\psi_2\right) &= E\,\psi_2\,,
\end{aligned} \tag{3.106}$$

de ale căror aplicaţii nu ne vom ocupa în cadrul prezentei lucrări.

3.3 Momentul cinetic total

3.3.1 Relaţii de comutatori

O particulă cu spinul 1/2, aflată în mişcare orbitală, are un moment cinetic total $\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$, căruia îi corespunde *operatorul moment cinetic total*

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}\,, \tag{3.107}$$

unde $\hat{\vec{L}}$ este operatorul moment cinetic orbital, iar $\hat{\vec{S}}$ este operatorul de spin. Operatorul $\hat{\vec{J}}$, cu componentele $\left\{\hat{J}_x,\,\hat{J}_y,\,\hat{J}_z\right\}$, este, de fapt,

$$\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}}\,I_{\mathcal{S}_2} + \hat{\vec{S}}\,I_{\mathcal{L}^2}\,,$$

deci acţionează pe spaţiul $\mathcal{L}^2 \otimes \mathcal{S}_2$, adică

$$\left[\hat{\vec{L}},\,\hat{\vec{S}}\right] = 0\,. \tag{3.108}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Relaţiile (3.5), (3.49) şi (3.108) ne permit să verificăm următoarele *reguli de comutare pentru componentele vectorului* $\hat{\vec{J}}$:

$$\left[\hat{J}_i\,,\,\hat{J}_j\right] = i\,\hbar\,\varepsilon_{ijk}\,\hat{J}_k\,. \tag{3.109}$$

Ca în cazurile celorlalte momente cinetice, putem defini operatorul

$$\hat{J}^2 = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 + \hat{J}_z^2\,, \tag{3.110}$$

care comută cu componentele lui $\hat{\vec{J}}$, adică

$$\left[\hat{J}^2\,,\,\hat{J}_x\right] = \left[\hat{J}^2\,,\,\hat{J}_y\right] = \left[\hat{J}^2\,,\,\hat{J}_z\right] = 0\,. \tag{3.111}$$

Cu ajutorul operatorilor

$$\hat{J}_\pm = \hat{J}_x \pm i\,\hat{J}_y\,, \tag{3.112}$$

relaţiile de comutare (3.109, 111) devin

$$\begin{aligned}
&\left[\hat{J}_z\,,\,\hat{J}_\pm\right] = \pm\,\hbar\,\hat{J}_\pm\,;\\
&\left[\hat{J}_+\,,\,\hat{J}_-\right] = 2\,\hbar\,\hat{J}_z\,;\\
&\left[\hat{J}^2\,,\,\hat{J}_\pm\right] = \left[\hat{J}^2\,,\,\hat{J}_z\right] = 0\,,
\end{aligned} \tag{3.113}$$

punând în evidenţă şi alte relaţii, cum ar fi:

$$\begin{aligned}
&\text{a)}\quad \hat{J}_+\,\hat{J}_- = \hat{J}^2 - \hat{J}_z\left(\hat{J}_z - \hbar\right)\\
&\text{b)}\quad \hat{J}_-\,\hat{J}_+ = \hat{J}^2 - \hat{J}_z\left(\hat{J}_z + \hbar\right)\\
&\text{c)}\quad \hat{J}^2 = \frac{1}{2}\left(\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+\right) + \hat{J}_z^2\,.
\end{aligned} \tag{3.114}$$

3.3.2 Funcţiile şi valorile proprii ale momentului cinetic total

Pentru a obţine *vectorii proprii şi valorile proprii ale operatorilor* $\hat{J}_z$ *şi* $\hat{J}^2$, să notăm valoarea proprie a lui $\hat{J}_z$ cu $m\hbar$, a lui $\hat{J}^2$ cu $j(j+1)\hbar^2$, iar vectorul propriu comun acestor doi operatori cu $|j,m\rangle \in \mathcal{L}^2 \otimes \mathcal{S}_2$. Aceste notaţii, inspirate din formulele (3.42, 43) – fără însă a constitui o particularizare, deoarece valorile

PU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

lui j şi m sunt încă nedeterminate–, ne permit să scriem ecuaţiile de vectori şi valori proprii sub forma

$$\hat{J}_z\,|j,m\rangle = m\hbar\,|j,m\rangle\,; \tag{3.115}$$
$$\hat{J}^2\,|j,m\rangle = j(j+1)\,\hbar^2\,|j,m\rangle. \tag{3.116}$$

Cum $\hat{J}^2$ este pozitiv definit, rezultă că $j \geq 0$ este o alegere potrivită (nu are rost să mai considerăm cazul $j \leq -1$) şi vom admite valabilitatea relaţiei

$$\langle j,m|j',m'\rangle = \delta_{jj'}\,\delta_{mm'}\,, \tag{3.117}$$

adică $|j,m\rangle$ formează o mulţime ortonormală de vectori. În relaţia

$$\left[\hat{J}^2\,,\,\hat{J}_+\right]|j,m\rangle = 0\,, \tag{3.118}$$

adică

$$\hat{J}^2\left(\hat{J}_+|j,m\rangle\right) = \hat{J}_+\left(\hat{J}^2|j,m\rangle\right),$$

înlocuim paranteza din membrul drept cu (3.116), adică

$$\hat{J}^2\left(\hat{J}_+|j,m\rangle\right) = j(j+1)\hbar^2\left(\hat{J}_+|j,m\rangle\right),$$

punând în evidenţă faptul că $\hat{J}_+|j,m\rangle$ este un vector propriu al lui $\hat{J}^2$, aparţinând valorii proprii $j(j+1)\hbar^2$. De asemenea, relaţia

$$\left[\hat{J}_z\,,\,\hat{J}_+\right]|j,m\rangle = \hbar\,\hat{J}_+|j,m\rangle\,, \tag{3.119}$$

adică

$$\hat{J}_z\,\hat{J}_+|j,m\rangle = \hat{J}_+\,\hat{J}_z\,|j,m\rangle + \hbar\,\hat{J}_+\,|j,m\rangle\,,$$

ne conduce – ţinând cont de (3.115) – la

$$\hat{J}_z\left(\hat{J}_+|j,m\rangle\right) = (m+1)\,\hbar\,\left(\hat{J}_+\,|j,m\rangle\right). \tag{3.120}$$

Astfel, rezultă că $\hat{J}_+|j,m\rangle$ este vector propriu al lui $\hat{J}_z$, aparţinând valorii proprii $(m+1)\hbar$, deci este valabilă relaţia

$$\hat{J}_+|j,m\rangle = C_+\,|j,m+1\rangle\,, \tag{3.121}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

unde C_+ este o constantă pe care urmează să o determinăm. În mod cu totul analog, se poate demonstra ecuaţia

$$\hat{J}_-|j,m\rangle = C_-\,|j,m-1\rangle\,. \tag{3.122}$$

Conjugând hermitic relaţiile (3.121) şi (3.122) şi ţinând cont de formulele cunoscute, $\hat{J}_+^\dagger = \hat{J}_-$ şi $\hat{J}_-^\dagger = \hat{J}_+$, vom obţine

$$\langle j,m|\,\hat{J}_- = C_+^*\,\langle j,m+1|\tag{3.123}$$

şi

$$\langle j,m|\,\hat{J}_+ = C_-^*\,\langle j,m-1|\,,\tag{3.124}$$

urmând să determinăm, în continuare, constantele $C_\pm$. Din (3.121) şi (3.123) rezultă imediat relaţia

$$\langle j,m|\,\hat{J}_-\,\hat{J}_+|j,m\rangle = |C_+|^2\,,\tag{3.125}$$

de unde, prin înlocuirea lui $\hat{J}_-\hat{J}_+$ cu (3.114.b) şi aplicarea relaţiilor de vectori şi valori proprii (3.115, 116), obţinem expresia

$$|C_+|^2 = \hbar^2\,[j(j+1)-m(m+1)]\,.\tag{3.126}$$

Neavând altă condiţie, vom admite că $C_+ \in \mathbf{R}_+$ este real şi putem scrie următoarea ecuaţie pentru $\hat{J}_+$:

$$\hat{J}_+\,|j,m\rangle = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\;|j,m+1\rangle\,.\tag{3.127}$$

În mod analog, vom obţine pentru constanta $C_- \in \mathbf{R}_+$ o expresie de forma

$$|C_-|^2 = \hbar^2\,[j(j+1)-m(m-1)]\tag{3.128}$$

care ne conduce la următoarea ecuaţie satisfăcută de operatorul $\hat{J}_-$:

$$\hat{J}_-\,|j,m\rangle = \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\;|j,m-1\rangle\,.\tag{3.129}$$

Observăm că relaţiile (3.127) şi (3.129), exprimând acţiunea operatorilor $\hat{J}_\pm$ asupra vectorilor proprii comuni operatorilor $\hat{J}^2$ şi $\hat{J}_z$, sunt foarte asemănătoare cu (3.44) şi (3.45) – enunţate fără demonstraţie – pentru momentul cinetic orbital. Aceste relaţii sunt consecinţe directe ale regulilor de comutare şi ne vor fi utile la scrierea matricelor asociate operatorilor moment cinetic total, în diferite reprezentări. Subliniem faptul că valabilitatea relaţiilor (3.127, 129), pentru momentul cinetic orbital, implică factorul de fază $(-1)^{(m+|m|)/2}$, ales la funcţiile sferice $Y_l^m(\theta,\varphi)$.

BUCUREŞTI / CENTRALA UNIVERSITY LIBRARY

3.3.3 Reprezentări matriceale

Operatorii $\hat{J}_+\hat{J}_-$ şi $\hat{J}_-\hat{J}_+$ fiind pozitiv definiţi, putem scrie relaţiile (vezi (3.126) şi (3.128))

$$\begin{aligned}(j-m)(j+m+1) &\geq 0, \text{ deci } -j-1 \leq m \leq j\,;\\ (j+m)(j-m+1) &\geq 0, \text{ deci } -j \leq m \leq j+1\,,\end{aligned}$$

a căror satisfacere simultană ne conduce la următorul domeniu:

$$-j \leq m \leq +j\,. \tag{3.130}$$

În ceea ce priveşte numărul cuantic m, din (3.127, 129), rezultă că acesta variază cu unitatea şi urmează să arătăm că $m = \pm j$ sunt soluţii pentru problema noastră. Astfel, pentru $m = j$, relaţiile (3.115, 116) şi (3.127, 129) capătă, respectiv, forma:

$$\begin{aligned}\hat{J}_z\,|j,j\rangle &= \hbar\, j\,|j,j\rangle\,;\\ \hat{J}^2\,|j,j\rangle &= \hbar^2\, j(j+1)\,|j,j\rangle\,;\\ \hat{J}_+\,|j,j\rangle &= 0\,;\\ \hat{J}_-\,|j,j\rangle &= \hbar\sqrt{2j}\,|j,j-1\rangle\,,\end{aligned}$$

regulile de comutare (3.113) fiind, de asemenea, satisfăcute. Demonstraţia pentru $m = -j$ decurgând absolut analog, să sintetizăm rezultatele obţinute până acum. Deci m variază între $-j$ şi j, cu câte o unitate, luând efectiv $2j+1$ valori. Cum $2j+1$ este un număr întreg, rezultă că j poate avea atât valori pozitive întregi, cât şi semiîntregi, adică şirul de valori pentru numărul cuantic j este

$$j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, 3, \ldots \tag{3.131}$$

Să trecem acum la scrierea matricelor asociate operatorilor moment cinetic total. Astfel, din relaţiile (3.127, 129, 115, 116), rezultă că singurele elemente diferite de zero ale acestor operatori sunt:

$$\begin{aligned}\langle j,m+1|\hat{J}_+|j,m\rangle &= \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,;\\ \langle j,m-1|\hat{J}_-|j,m\rangle &= \hbar\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,;\\ \langle j,m|\hat{J}_z|j,m\rangle &= \hbar\, m\,;\\ \langle j,m|\hat{J}^2|j,m\rangle &= \hbar^2\, j(j+1)\,,\end{aligned}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

punând în evidenţă faptul că, pentru un j fixat, matricele (J^2) şi (J_z) sunt simultan diagonalizabile, în orice reprezentare, având pe diagonală elemente egale cu $\hbar^2 j(j+1)$ şi, respectiv, cu valorile proprii $m\hbar$, unde $-j \leq m \leq j$, adică

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad (J^2)_{m,m} = \hbar^2 j(j+1) \\ &\text{b)} \quad (J_z)_{m,m} = \hbar m . \end{aligned} \tag{3.132}$$

Matricele $(J_\pm)$ au singurele elemente nenule

$$(J_+)_{m+1,m} = (J_-)_{m,m+1} = \hbar\sqrt{(j-m)(j+m+1)}, \tag{3.133}$$

şi convenim ca numerotarea liniilor şi coloanelor să se facă după valorile lui m, în ordine descrescătoare, adică, pentru $j = 3/2$, elementele matriceale să fi dispuse ca în tabelul

m/m'	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$
$\frac{3}{2}$	.	.	.	.
$\frac{1}{2}$	.	.	.	.
$-\frac{1}{2}$	.	.	.	.
$-\frac{3}{2}$	.	.	.	.

Prezentăm două exemple de matrice asociate operatorilor moment cinetic total.

- Dacă $j = 1/2$ şi $m = \pm 1/2$, matricele $(J)_\pm$ şi (J_z), cu elementele (3.133) şi (3.132.b), au expresiile concrete

$$(J)_+ = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} ; \quad (J)_- = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} ;$$
$$(J)_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{3.134}$$

conducând, cu ajutorul relaţiei (3.112), la următoarele matrice:

$$(J)_x = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad (J)_y = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \tag{3.135}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

care coincid cu $\frac{\hbar}{2}\times$ matricele lui Pauli σ_x, σ_y din (3.62).

- În mod analog, pentru $j=1$, adică $m=0,\pm 1$, obţinem matricele:

$$\text{a)}\quad (J)_+ = \hbar\begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};\quad (J)_- = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix};$$

$$\text{b)}\quad (J)_z = \hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{3.136}$$

respectiv

$$(J)_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix};\quad (J)_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \tag{3.137}$$

împreună cu $(J)_z$ dat de (3.136.b).

$$\star$$
$$\star \qquad \star$$

Aşa cum am menţionat în încheierea paragrafului 3.2.3, în baza izomorfismului dintre algebrele $\mathcal{SU}(2)$ şi $\mathcal{O}(3)$, putem utiliza relaţii de tipul (3.127, 129), satisfăcute de vectorii rădăcină ai celor două algebre (cu $\hbar=1$), pentru a găsi expresiile matricelor asociate generatorilor lui $\mathcal{SU}(2)$, în diferite reprezentări, de dimensiune întreagă şi pozitivă.

(i) Pentru dubleţii de izospin de tipul dubletului proton–neutron sau dubletului *quark up–quark down*,

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \psi^1(x) \\ \psi^2(x) \end{pmatrix}, \tag{3.138}$$

unde $\psi^1(x)$, $\psi^2(x)$ sunt bispinori Lorentz, corespunzând valorilor proprii $t_3 = \pm 1/2$ ale lui T^3, vom utiliza o reprezentare bidimensională, asociind generatorilor matricele

$$T^i = \frac{\sigma^i}{2},\quad i=\overline{1,3}, \tag{3.139}$$

satisfăcând algebra (3.86), unde $\{\sigma^i\}_{i=\overline{1,3}}$ sunt matricele Pauli.

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(ii) Pentru izotripleţii

$$\Phi(x) = \begin{pmatrix} \phi^1(x) \\ \phi^2(x) \\ \phi^3(x) \end{pmatrix}, \tag{3.140}$$

corespunzători lui $t_3 = 0, \pm 1$, câmpurile scalare $\phi^1(x)$, $\phi^2(x)$, $\phi^3(x)$ pot fi asociate, de exemplu, tripletului mezonic $\{\pi^0, \pi^\pm\}$. Deci trebuie să considerăm o reprezentare 3-dimensională, cu matricele generatorilor obţinute din (3.132.b, 133, 112), având forma concretă (3.136.b, 137).

(iii) Pentru multipletul rezonanţelor $N^*_{\frac{3}{2}}$ $\left(t_3 = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}\right)$ vom considera, evident,

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \psi^1(x) \\ \psi^2(x) \\ \psi^3(x) \\ \psi^4(x) \end{pmatrix} \tag{3.141}$$

şi vom asocia generatorilor, într-o reprezentare 4-dimensională, matricele

$$T_1 = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{pmatrix};$$

$$T_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & -i\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & i\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \end{pmatrix};$$

$$T_3 = \begin{pmatrix} \frac{3}{2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{3}{2} \end{pmatrix}, \tag{3.142}$$

construite tot cu ajutorul relaţiilor (3.132.b, 133, 112), cu $\hbar = 1$, şi satisfăcând algebra (3.86).

În cele trei exemple prezentate mai sus, conţinutul de particule al multipletului a impus *reprezentări de diferite dimensiuni*, doi, trei sau patru, pentru generatorii *aceleiaşi algebre*, $\mathcal{SU}(2)$.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Elementele de grupuri şi algebre Lie, prezentate în secţiunea 3.2.3, pot fi extinse şi la alte grupuri, de dimensiune mai mare. Astfel, grupul $SU(3)$ are $n = N^2 - 1 = 8$ parametri independenţi, $\{\theta^a\}_{a=\overline{1,8}}$, iar algebra Lie asociată este opt-dimensională, adică

$$[F_a\,,\,F_b] = if_{abc}F^c\,, \tag{3.143}$$

constantele de structură nenule fiind

$$f_{123} = 1\,,\; f_{458} = f_{678} = \frac{\sqrt{3}}{2}\,,$$
$$f_{147} = f_{246} = f_{345} = f_{516} = f_{257} = f_{637} = \frac{1}{2}\,. \tag{3.144}$$

Într-o reprezentare 3-dimensională, ce acţionează asupra tripleţilor

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix} \psi^1(x) \\ \psi^2(x) \\ \psi^3(x) \end{pmatrix}, \tag{3.145}$$

unde $\{\psi^1,\, \psi^2,\, \psi^3\}$ pot fi bispinori reprezentând primele trei quark-uri introduse, adică $\{u,\, d,\, s\}$, generatorilor li se vor asocia matricele $F_a = \frac{\lambda_a}{2}$, satisfăcând (3.143) cu constantele de structură (3.144), unde matricele $\{\lambda_a\}_{a=\overline{1,8}}$, de forma

$$\lambda_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},\; \lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},\; \lambda_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$
$$\lambda_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},\; \lambda_5 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix},\; \lambda_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$
$$\lambda_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix},\; \lambda_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}, \tag{3.146}$$

sunt denumite *matricele Gell-Mann* [22].

3.4 Aplicaţie la funcţiile şi valorile proprii ale momentelor cinetice

Teoria momentelor cinetice prezentată în acest capitol ne permit să găsim expresiile concrete ale funcţiilor de undă asociate unei particule de spin 1/2 care se

BCU IAŞI CENTRALA UNIVERSITY LIBRARY

mişcă în câmpul unor forţe centrale şi care sunt, în acelaşi timp, funcţii proprii ale operatorilor $\hat{L}^2$, $\hat{J}^2$ şi $\hat{J}_z$ [9].

Utilizând expresia (3.25.c) pentru $\hat{L}_z$ în coordonate sferice, matricea asociată operatorului $\hat{J}_z = \hat{L}_z + \hat{S}_z$ capătă forma concretă

$$\begin{aligned} \hat{J}_z &= \hat{L}_z \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{\hbar}{2} & 0 \\ 0 & \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{\hbar}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{3.147}$$

Ecuaţia de vectori şi valori proprii, (3.115), devine

$$\hbar \begin{pmatrix} \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} + \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & \frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial\varphi} - \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \hbar\, m_j \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \tag{3.148}$$

şi conduce la sistemul de ecuaţii diferenţiale decuplate:

$$\begin{aligned} \frac{\partial\psi_1}{\partial\varphi} &= i\left(m_j - \frac{1}{2}\right)\psi_1 \\ \frac{\partial\psi_2}{\partial\varphi} &= i\left(m_j + \frac{1}{2}\right)\psi_2 \,. \end{aligned} \tag{3.149}$$

Soluţiile ψ_1 şi ψ_2 sunt de forma

$$\begin{aligned} \psi_1(r,\theta,\varphi) &= A(r,\theta)\, e^{i(m_j-\frac{1}{2})\varphi}\,, \\ \psi_2(r,\theta,\varphi) &= B(r,\theta)\, e^{i(m_j+\frac{1}{2})\varphi}\,, \end{aligned} \tag{3.150}$$

unde părţile $A(r,\theta)$ şi $B(r,\theta)$ au rămas nedeterminate. Pe de altă parte, se cunosc funcţiile proprii ale operatorului $\hat{L}^2$ ca fiind funcţiile sferice (1.121), adică (vezi Anexa **A.3**)

$$\begin{aligned} Y_\ell^m(\theta,\varphi) &= \Theta_{\ell m}(\theta)\,\phi_m(\varphi) = \\ &= (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{1/2} P_\ell^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi}\,. \end{aligned}$$

Rezultă că funcţiile proprii comune celor doi operatori vor fi:

$$\begin{aligned} \psi_1(r,\theta,\varphi) &= R_1(r)\, Y_\ell^{m_j-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi) \\ \psi_2(r,\theta,\varphi) &= R_2(r)\, Y_\ell^{m_j+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\,. \end{aligned} \tag{3.151}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Trecem la operatorul

$$\hat{J}^2 = \hat{L}^2 + \hat{S}^2 + 2\hat{L}\cdot\hat{S}, \tag{3.152}$$

căruia îi asociem matricea

$$\left(J^2\right) = \hat{L}^2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\hbar^2}{4}\left(\sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2\right) + \hbar \begin{pmatrix} \hat{L}_z & \hat{L}_- \\ \hat{L}_+ & -\hat{L}_z \end{pmatrix}, \tag{3.153}$$

adică

$$\left(J^2\right) = \begin{pmatrix} \hat{L}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar\hat{L}_z & \hbar\hat{L}_- \\ \hbar\hat{L}_+ & \hat{L}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar\hat{L}_z \end{pmatrix}. \tag{3.154}$$

Aceasta ne permite să scriem ecuaţia (3.116) în forma matriceală

$$\begin{pmatrix} \hat{L}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar\hat{L}_z & \hbar\hat{L}_- \\ \hbar\hat{L}_+ & \hat{L}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar\hat{L}_z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \hbar^2 j(j+1) \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} \tag{3.155}$$

şi ne conduce la sistemul de ecuaţii diferenţiale:

$$\begin{aligned} \left(\hat{L}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 + \hbar\hat{L}_z\right)\psi_1 + \hbar\hat{L}_-\psi_2 &= \hbar^2 j(j+1)\,\psi_1 \\ \hbar\hat{L}_+\psi_1 + \left(\hat{L}^2 + \frac{3}{4}\hbar^2 - \hbar\hat{L}_z\right)\psi_2 &= \hbar^2 j(j+1)\,\psi_2 . \end{aligned} \tag{3.156}$$

Explicitând acţiunea operatorilor $\hat{L}^2$, $\hat{L}_z$, $\hat{L}_+$ şi $\hat{L}_-$ asupra vectorilor $\psi_{1,2}$ cu ajutorul relaţiilor (3.42–45), adică

$$\begin{aligned} \hat{L}^2\psi_1 &= \hbar^2\,\ell(\ell+1)\,R_1\,Y_\ell^{m_j-\frac{1}{2}}, \\ \hat{L}^2\psi_2 &= \hbar^2\,\ell(\ell+1)\,R_2\,Y_\ell^{m_j+\frac{1}{2}}, \\ \hat{L}_z\psi_1 &= \hbar\left(m_j - \frac{1}{2}\right)R_1\,Y_\ell^{m_j-\frac{1}{2}}, \\ \hat{L}_z\psi_2 &= \hbar\left(m_j + \frac{1}{2}\right)R_2\,Y_\ell^{m_j+\frac{1}{2}}, \\ \hat{L}_+\psi_1 &= \hbar\sqrt{\left(\ell - m_j + \frac{1}{2}\right)\left(\ell + m_j + \frac{1}{2}\right)}\,R_1\,Y_\ell^{m_j+\frac{1}{2}}, \\ \hat{L}_-\psi_2 &= \hbar\sqrt{\left(\ell + m_j + \frac{1}{2}\right)(\ell - m_j + \frac{1}{2})}\,R_2\,Y_\ell^{m_j-\frac{1}{2}}, \end{aligned} \tag{3.157}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

obţinem, pentru funcţiile radiale $R_{1,2}$, sistemul omogen de ecuaţii:

$$\begin{aligned}\left[\ell(\ell+1)+\frac{3}{4}+\left(m_j-\frac{1}{2}\right)-j(j+1)\right]R_1+\sqrt{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)^2-m_j^2}\,R_2 &= 0\,;\\ \sqrt{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)^2-m_j^2}\,R_1+\left[\ell(\ell+1)+\frac{3}{4}-\left(m_j+\frac{1}{2}\right)-j(j+1)\right]R_2 &= 0\,.\end{aligned} \tag{3.158}$$

Impunând $\Delta = 0$, rezultă două valori posibile pentru j,

$$j = \ell \pm \frac{1}{2}\,. \tag{3.159}$$

Corespunzător, $R_{1,2}$ se exprimă prin intermediul unei singure funcţii $R(r)$, ce va fi determinată de forma concretă a potenţialului câmpului central. Astfel, avem:

$$\begin{aligned}R_1(r) &= \sqrt{\ell+m_j+\frac{1}{2}}\,R(r)\,;\\ R_2(r) &= \sqrt{\ell-m_j+\frac{1}{2}}\,R(r)\,,\end{aligned} \tag{3.160}$$

pentru $j = \ell + 1/2$ şi

$$\begin{aligned}R_1(r) &= -\sqrt{\ell-m_j+\frac{1}{2}}\,R(r)\,;\\ R_2(r) &= \sqrt{\ell+m_j+\frac{1}{2}}\,R(r)\,,\end{aligned} \tag{3.161}$$

pentru $j = \ell - 1/2$.

În concluzie, putem scrie forma concretă a funcţiilor de undă comune operatorilor $\hat{L}^2$, $\hat{J}^2$, $\hat{J}_z$ ca fiind:

$$\psi(r,\theta,\varphi) = C\,R(r)\begin{pmatrix}\sqrt{\ell+m_j+\frac{1}{2}} & Y_\ell^{m_j-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\\ \sqrt{\ell-m_j+\frac{1}{2}} & Y_\ell^{m_j+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\end{pmatrix}, \tag{3.162}$$

pentru $j = \ell + \frac{1}{2}$ şi, respectiv,

$$\psi(r,\theta,\varphi) = C\,R(r)\begin{pmatrix}-\sqrt{\ell-m_j+\frac{1}{2}} & Y_\ell^{m_j-\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\\ \sqrt{\ell+m_j+\frac{1}{2}} & Y_\ell^{m_j+\frac{1}{2}}(\theta,\varphi)\end{pmatrix}, \tag{3.163}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

pentru $j = \ell - \frac{1}{2}$. Constanta C asigură normarea funcţiilor de undă, adică

$$\left[\left(\ell + m_j + \frac{1}{2}\right) + \left(\ell - m_j + \frac{1}{2}\right)\right] C^2 = 1 ,$$

şi are expresia concretă

$$C = \frac{1}{\sqrt{2\ell + 1}} .$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Partea II

TEORIA PERTURBAŢIILOR. PROCESE CUANTICE DE ÎMPRĂŞTIERE. SISTEME DE PARTICULE

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Cuprins

II TEORIA PERTURBAŢIILOR. PROCESE CUANTICE DE ÎMPRĂŞTIERE. SISTEME DE PARTICULE 155

4 Teoria perturbaţiilor 159
4.1 Teoria perturbaţiilor independente de timp 159
4.1.1 Cazul nedegenerat 161
4.1.2 Starea fundamentală a atomului de heliu 163
4.2 Operatori de proiecţie 166
4.2.1 Exemple de proiectori 168
4.2.2 Algebra proiectorilor 170
4.3 Teoria perturbaţiilor independente de timp. Cazul degenerat . . 172
4.4 Electronul în câmp magnetic omogen 174
4.4.1 Câmpul magnetic slab. Efectul Zeeman 175
4.4.2 Câmpul magnetic puternic. Proprietăţile diamagnetice ale substanţei 178
4.5 Metoda variaţională 179
4.6 Perturbaţii dependente de timp 181
4.6.1 Metoda iterativă 183
4.6.2 Metoda soluţiei formale 185
4.6.3 Excitarea atomilor cu lumină monocromatică 187
4.6.4 Electronul în câmp magnetic variabil în timp 191

5 Elemente de teoria ciocnirilor 195
5.1 Secţiunea de difuzie 195
5.2 Ecuaţia diferenţială a împrăştierii 197
5.3 Aproximaţia Born 198
5.4 Împrăştierea particulelor în potenţialele Yukawa şi coulombian . 202

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

5.5 Metoda undelor parţiale 203

6 Sisteme de particule **209**
6.1 Ecuaţia de continuitate 210
6.2 Sisteme de particule identice 211
6.3 Aproximaţia Born–Oppenheimer 214
6.4 Ecuaţia Hartree–Fock 216
6.5 Molecula de hidrogen. Starea fundamentală 219
6.6 Cuplajul de spin Heisenberg 225
6.7 Interacţiunea spin–orbită 229
6.8 Cuplajul a două momente cinetice 230
6.9 Sistemele $K^0 - \bar{K}^0$ şi $B^0 - \bar{B}^0$. Violarea simetriei CP 234

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Capitolul 4

Teoria perturbaţiilor

Deoarece în Mecanica Cuantică există puţine probleme care admit o soluţie exactă, în formă închisă, a ecuaţiei Schrödinger, în foarte multe situaţii – importante din punct de vedere fizic – se apelează la metode de aproximare [6, 9, 20, 44]. În prezentul capitol ne vom ocupa de o astfel de metodă, atât în cazul spectrului energetic nedegenerat, cât şi în cazul degenerat.

4.1 Teoria perturbaţiilor independente de timp

Să considerăm, pentru început, cazul unui sistem cuantic descris de un hamiltonian *independent de timp*, $\hat{H}$, pentru care căutăm o soluţie aproximativă a ecuaţiei Schrödinger. Vom despica acest hamiltonian în două părţi, anume

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \lambda V\,. \tag{4.1}$$

Acestă despicare trebuie să satisfacă două condiţii.

a) Pentru *hamiltonianul neperturbat*, $\hat{H}_0$, cunoaştem soluţia completă a ecuaţiei

$$\hat{H}_0\,|i,\alpha\rangle = E_i^0\,|i,\alpha\rangle\,, \tag{4.2}$$

unde $E_i \neq E_k$, pentru $i \neq k$, iar α numerotează vectorii proprii în cazul degenerat. Presupunem $\{|i,\alpha\rangle\}$ o bază ortonormală în spaţiul Hilbert.

b) λV, cu λ un parametru real, este o "mică" *perturbaţie*, specificată mai jos. Se caută nivelul energetic perturbat E_a, soluţie a ecuaţiei de vectori

BCU IAŞI / CENTRALA UNIVERSITY LIBRARY

şi valori proprii pentru hamiltonianul (4.1),

$$\hat{H}|\psi\rangle = E_a|\psi\rangle\,, \tag{4.3}$$

în ipoteza $E_a \overset{\lambda\to 0}{\to} E_a^0$. Perturbaţie mică înseamnă că E_a este foarte apropiat de E_a^0, adică

$$\frac{E_a - E_a^0}{E_a^0} \ll 1\,. \tag{4.4}$$

În aceste condiţii, putem scrie următoarele dezvoltări în serie:

$$E_a = E_a^0 + \lambda\varepsilon_1 + \lambda^2\varepsilon_2 + \ldots + \lambda^n\varepsilon_n + \ldots\,, \tag{4.5}$$

unde ε_n este corecţia *energetică* de ordin n şi, corespunzător, pentru corecţiile de ordin superior ale funcţiei de stare,

$$|\psi\rangle = |0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle + \ldots + \lambda^n|n\rangle + \ldots\,, \tag{4.6}$$

$|0\rangle$ fiind *starea neperturbată*, adică soluţia ecuaţiei

$$\hat{H}_0|0\rangle = E_a^0|0\rangle\,.$$

Cum $|\psi\rangle$ conţine o constantă arbitrară, putem impune

$$\langle 0|\psi\rangle = 1\,, \tag{4.7}$$

şi rezultă, pe lângă condiţia de normare $\langle 0|0\rangle = 1$, următorul şir de relaţii:

$$\langle 0|1\rangle = \langle 0|2\rangle = \ldots = \langle 0|n\rangle = \ldots = 0\,, \tag{4.8}$$

deoarece λ este un parametru arbitrar. Înlocuind (4.1, 5, 6) în (4.3), adică

$$\begin{aligned}&(\hat{H}_0 + \lambda V)(|0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle + \ldots + \lambda^n|n\rangle + \ldots) - \\ &- (E_a^0 + \lambda\varepsilon_1 + \lambda^2\varepsilon_2 + \ldots + \lambda^n\varepsilon_n + \ldots) \times \\ &\times (|0\rangle + \lambda|1\rangle + \lambda^2|2\rangle + \ldots + \lambda^n|n\rangle + \ldots) = 0\,,\end{aligned} \tag{4.9}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi identificând cu zero coeficienţii diferitelor puteri ale lui λ, obţinem următoarele ecuaţii:

$$\begin{aligned}
&\text{a)} \quad \left(\hat{H}_0 - E_a^0\right)|0\rangle = 0 \\
&\text{b)} \quad \left(\hat{H}_0 - E_a^0\right)|1\rangle + (V - \varepsilon_1)|0\rangle = 0 \\
&\text{c)} \quad \left(\hat{H}_0 - E_a^0\right)|2\rangle + (V - \varepsilon_1)|1\rangle - \varepsilon_2|0\rangle = 0 \\
&\quad \cdots\cdots\cdots \\
&\text{d)} \quad \left(\hat{H}_0 - E_a^0\right)|n\rangle + (V - \varepsilon_1)|n-1\rangle - \varepsilon_2|n-2\rangle - \ldots - \varepsilon_n|0\rangle = 0 \\
&\quad \cdots\cdots\cdots
\end{aligned} \tag{4.10}$$

Aici problema se despică în două. Dacă starea aparţinând energiei E_a^0 este nedegenerată, atunci vectorul $|0\rangle$ este cunoscut. În caz contrar, despre $|0\rangle$ ştim doar că face parte din subspaţiul determinat de vectorii bazei $\{|a,\alpha\rangle\}$, cu $\alpha = \overline{1,f}$, f fiind gradul degenerării.

4.1.1 Cazul nedegenerat

Înmulţim scalar cu $\langle 0|$ relaţia (4.10.d) şi obţinem:

$$\underbrace{\langle 0|\left(\hat{H}_0 - E_a^0\right)}_{=0}|n\rangle + \langle 0|V|n-1\rangle - \\ - \varepsilon_1 \underbrace{\langle 0|n-1\rangle}_{=0} - \ldots - \varepsilon_{n-1}\underbrace{\langle 0|1\rangle}_{=0} - \varepsilon_n \underbrace{\langle 0|0\rangle}_{=1} = 0\,,$$

adică

$$\varepsilon_n = \langle 0|V|n-1\rangle\,. \tag{4.11}$$

Pe de altă parte, înmulţim pe (4.10.d) cu $\langle i,\alpha|$, unde $i \neq a$, adică

$$\langle i,\alpha|\left(\hat{H}_0 - E_a^0\right)|n\rangle + \langle i,\alpha|(V-\varepsilon_1)|n-1\rangle - \\ - \varepsilon_2\langle i,\alpha|n-2\rangle - \ldots - \varepsilon_{n-1}\langle i,\alpha|1\rangle - \varepsilon_n\underbrace{\langle i,\alpha|0\rangle}_{=0} = 0\,,$$

şi, ţinând cont de (4.2) în relaţia

$$\langle i,\alpha|\left(\hat{H}_0 - E_a^0\right) = \underbrace{\langle i,\alpha|\left(\hat{H}_0 - E_i^0\right)}_{=0} + \langle i,\alpha|\left(E_i^0 - E_a^0\right),$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

obţinem

$$\left(E_i^0 - E_a^0\right)\langle i,\alpha|n\rangle + \langle i,\alpha|\left(V-\varepsilon_1\right)|n-1\rangle - \\ -\varepsilon_2\langle i,\alpha|n-2\rangle - \ldots - \varepsilon_{n-1}\langle i,\alpha|1\rangle = 0\,,$$

adică

$$\langle i,\alpha|n\rangle = \frac{1}{E_a^0 - E_i^0} \times \\ \times \left[\langle i,\alpha|\left(V-\varepsilon_1\right)|n-1\rangle - \varepsilon_2\langle i,\alpha|n-2\rangle - \ldots - \varepsilon_{n-1}\langle i,\alpha|1\rangle\right]. \tag{4.12}$$

Vectorul $|n\rangle$ poate fi scris, prin includerea operatorului unitar, sub forma

$$|n\rangle = \sum_{i,\alpha} |i,\alpha\rangle\langle i,\alpha|n\rangle = |0\rangle \underbrace{\langle 0|n\rangle}_{=0} + \sum_{i\neq a,\alpha} |i,\alpha\rangle\langle i,\alpha|n\rangle\,,$$

adică

$$|n\rangle = \sum_{i\neq a,\alpha} |i,\alpha\rangle\langle i,\alpha|n\rangle\,, \tag{4.13}$$

unde proiecţiile $\langle i,\alpha|n\rangle$ au expresiile (4.12).

Corecţia de ordin 1 pentru nivelurile energetice rezultă imediat din (4.11), pentru $n = 1$, sub forma:

$$\varepsilon_1 = \langle 0|V|0\rangle\,. \tag{4.14}$$

Pentru corecţia de ordin 2, ε_2, relaţia (4.12) devine

$$\langle i,\alpha|1\rangle = \frac{\langle i,\alpha|V|0\rangle}{E_a^0 - E_i^0}\,, \tag{4.15}$$

conducând, prin înlocuire în (4.13), adică

$$|1\rangle = \sum_{i\neq a,\alpha} \frac{|i,\alpha\rangle\langle i,\alpha|V|0\rangle}{E_a^0 - E_i^0}\,, \tag{4.16}$$

la expresia corecţiei ε_2 ca fiind;

$$\varepsilon_2 = \sum_{i\neq a,\alpha} \frac{\langle 0|V|i,\alpha\rangle\langle i,\alpha|V|0\rangle}{E_a^0 - E_i^0}\,. \tag{4.17}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

În particular, dacă $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = \ldots = \varepsilon_{n-1} = 0$, relaţiile (4.15, 16, 17) devin, respectiv:

$$\langle i,\alpha|n\rangle = \frac{\langle i,\alpha|V|n-1\rangle}{E_a^0 - E_i^0}, \tag{4.18}$$

$$|n\rangle = \sum_{i\neq a,\alpha} \frac{|i,\alpha\rangle\langle i,\alpha|V|n-1\rangle}{E_a^0 - E_i^0}, \tag{4.19}$$

$$\varepsilon_n = \sum_{i\neq a,\alpha} \frac{\langle 0|V|i,\alpha\rangle\langle i,\alpha|V|n-2\rangle}{E_a^0 - E_i^0}. \tag{4.20}$$

4.1.2 Starea fundamentală a atomului de heliu

Considerăm sistemul format dintr-un nucleu, de sarcină Ze, cu $Z = 2$, şi doi electroni, descris de hamiltonianul

$$\hat{H} = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_2} + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}}, \tag{4.21}$$

unde r_1 şi r_2 sunt distanţele dintre electroni şi nucleu, iar r_{12} este distanţa dintre electroni. Punem în evidenţă hamiltonianul neperturbat

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_0^1 + \hat{H}_0^2, \tag{4.22}$$

unde am utilizat notaţiile:

$$\hat{H}_0^1 = \frac{p_1^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_1} \tag{4.23}$$

$$\hat{H}_0^2 = \frac{p_2^2}{2m} - \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0 r_2}, \tag{4.24}$$

şi perturbaţia

$$V = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r_{12}}, \tag{4.25}$$

exprimând tocmai energia potenţială coulombiană de interacţiune dintre cei doi electroni. Pentru starea neperturbată, considerată ca superpoziţia

$$|0\rangle = |0_1(\vec{r}_1)\rangle\,|0_2(\vec{r}_2)\rangle, \text{ unde } E_a^0 = E_{a1}^0 + E_{a2}^0, \tag{4.26}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

ecuaţia (4.2), cu $i = a$, devine

$$|0_2(\vec{r}_2)\rangle \left(\hat{H}_0^1 - E_{a1}^0\right) |0_1(\vec{r}_1)\rangle + |0_1(\vec{r}_1)\rangle \left(\hat{H}_0^2 - E_{a2}^0\right) |0_2(\vec{r}_2)\rangle = 0\,,$$

sau

$$\frac{1}{|0_1(\vec{r}_1)\rangle} \left(\hat{H}_0^1 - E_{a1}^0\right) |0_1(\vec{r}_1)\rangle + \frac{1}{|0_2(\vec{r}_2)\rangle} \left(\hat{H}_0^2 - E_{a2}^0\right) |0_2(\vec{r}_2)\rangle = 0\,,$$

(aici am utilizat o scriere formală, considerând, de fapt, împărţirea cu funcţiile proprii corespunzătoare) şi conduce la următoarele ecuaţii decuplate:

$$\begin{aligned} \left(\hat{H}_0^1 - E_{a1}^0\right) |0_1(\vec{r}_1)\rangle &= 0 \\ \left(\hat{H}_0^2 - E_{a2}^0\right) |0_2(\vec{r}_2)\rangle &= 0\,. \end{aligned} \tag{4.27}$$

Soluţiile acestora coincid cu cele de la ionul hidrogenoid, pentru $n = 1$, fiind de forma [2]

$$\begin{aligned} |0_1(\vec{r}_1)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\, e^{-r_1/a} \\ |0_2(\vec{r}_2)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}}\, e^{-r_2/a}\,, \quad \text{unde } a = \frac{4\pi\varepsilon_0\hbar^2}{mZe^2}\,, \end{aligned} \tag{4.28}$$

cu energia nivelului fundamental

$$E_{a1}^0 = E_{a2}^0 = -Z^2\, E_H\,. \tag{4.29}$$

Sintetizând rezultatele (4.26, 28, 29), putem scrie soluţia problemei neperturbate ca fiind

$$\begin{aligned} |0\rangle &= \frac{1}{\pi a^3} \exp\left(\frac{-(r_1 + r_2)}{a}\right) \\ E_a^0 &= -2Z^2\, E_H\,. \end{aligned} \tag{4.30}$$

Să trecem acum la calculul aproximaţiei de ordin 1, a nivelului energetic fundamental, pentru atomul de heliu [36]. Astfel, înlocuind (4.25) şi (4.30) în (4.14), ajungem la expresia

$$\varepsilon_1 = \frac{e^2}{(4\pi\varepsilon_0)(\pi a^3)^2} \int \frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \exp\left(-2\,\frac{r_1 + r_2}{a}\right) d\vec{r}_1\, d\vec{r}_2\,, \tag{4.31}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

sau

$$\varepsilon_1 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0} \int \frac{\rho(r_1)\,\rho(r_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\, d\vec{r}_1\, d\vec{r}_2\,, \tag{4.32}$$

în care am utilizat notaţia

$$\rho(r) = \frac{1}{\pi a^3} \exp\left(-2\frac{r}{a}\right). \tag{4.33}$$

Calculăm, separat, integrala după variabilele $\vec{r}_2$, adică

$$\mathcal{I} = \int \frac{\rho(r_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\, d\vec{r}_2 = \int_S \frac{\rho(r_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\, d\vec{r}_2 + \int_{C(S)} \frac{\rho(r_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\, d\vec{r}_2\,, \tag{4.34}$$

unde S este sfera cu centrul în origine şi rază r_1, iar $C(S)$ este complementara sa, ţinând cont de relaţiile:

$$\int_S \frac{\rho(r_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\, d\vec{r}_2 = \frac{1}{r_1} \int_S \rho(r_2)\, d\vec{r}_2\,,$$

$$\int_{C(S)} \frac{\rho(r_2)}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\, d\vec{r}_2 = \int_S \frac{\rho(r_2)}{r_2}\, d\vec{r}_2\,.$$

Ambele relaţii rezultă din electrostatică, anume din calculul potenţialului electric în cazul unei distribuţii de sarcini cu simetrie sferică. Prima dată avem de-a face cu potenţialul în exteriorul sferei (la limita suprafeţei), care este acelaşi ca şi când toată sarcina ar fi concentrată în centrul sferei, adică

$$\frac{Q}{r_1} = \int \rho(r_2)\, \frac{d\vec{r}_2}{r_1}\,,$$

unde am efectuat raţionamentul în sistemul neraţionalizat, deci fără $4\pi\varepsilon_0$ la numitor. A doua oară, avem o distribuţie de sarcină în exteriorul sferei, potenţialul fiind calculat în interior (din nou, la limita suprafeţei). Dar, în acest caz, potenţialul în interiorul sferei este constant, deci îl putem calcula în centrul sferei, unde $\vec{r}_1 = 0$.

Astfel, aducem integrala $\mathcal{I}$ la forma

$$\mathcal{I} = 4\pi \left\{ \frac{1}{r_1} \int_0^{r_1} \rho(r_2)\, r_2^2\, dr_2 + \int_{r_1}^{\infty} \rho(r_2)\, r_2\, dr_2 \right\}, \tag{4.35}$$

cu al cărei rezultat,

$$\mathcal{I} = \pi a^2 \left\{ \frac{a}{r_1} - \left(1 + \frac{a}{r_1}\right) \exp\left(-2\frac{r_1}{a}\right) \right\}, \tag{4.36}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

revenim la (4.32) şi obţinem

$$\varepsilon_1 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0}\int \rho(r_1)\,\mathcal{I}(r_1)\,d\vec{r}_1 = \frac{5}{8}\,\frac{e^2}{(4\pi\varepsilon_0)\,a}\,. \tag{4.37}$$

În concluzie, expresia finală a corecţiei de ordin unu, a primului nivel energetic al atomului de heliu este

$$\varepsilon_1 = \frac{5}{4}\,Z\,E_H\,, \tag{4.38}$$

unde am ţinut cont de relaţia

$$\frac{e^2}{2(4\pi\varepsilon_0)a} = \frac{mZe^4}{2(4\pi\varepsilon_0)^2\hbar^2} = Z\,E_H\,. \tag{4.39}$$

Cu această corecţie, energia nivelului fundamental este

$$E_a = -2\,Z^2\,E_H + \frac{5}{4}\,Z\,E_H\,, \tag{4.40}$$

valoarea sa numerică, $E_{teor} = -74\,\text{eV}$, fiind foarte apropiată de valoarea experimentală, $E_{exp} = -78,6\,\text{eV}$.

În încheiere, vom prezenta un tabel cuprinzând valorile teoretice ale energiei nivelului fundamental (calculate cu ajutorul formalismului teoriei perturbaţiilor, descris în acest capitol, prin includerea corecţiei de ordin unu) şi valorile experimentale (exprimate în eV), pentru atomi cu $Z = 2,\ 3,\ 4$.

	Z	E_a^0	$\lambda\varepsilon_1$	E_{teor}	E_{exp}	*eroare*
He	2	-108	34	-74	$-78,6$	5,85 %
Li^+	3	$-243,5$	50,5	-193	$-197,1$	2,08 %
Be^{++}	4	-433	67,5	$-365,5$	$-370,0$	1,22 %

Observăm că, pentru $Z = 1$, relaţia (4.40) ne conduce la o valoare negativă, $E_a < 0$, deci ionul negativ de hidrogen este metastabil.

4.2 Operatori de proiecţie

Fie $\mathcal{H}$ un spaţiu Hilbert şi $\mathcal{S}$ un subspaţiu al său, cu complementarul $\mathcal{S}^*$, definit ca mulţimea vectorilor perpendiculari pe $\mathcal{S}$. Pentru orice $u \in \mathcal{H}$, avem despicarea *unică*

$$|u\rangle = |u_s\rangle + |u_{s^*}\rangle\,, \tag{4.41}$$

cu $|u_s\rangle \in \mathcal{S}$ şi $|u_{s^*}\rangle \in \mathcal{S}^*$.

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Demonstraţie

Presupunem că există o altă despicare

$$|u\rangle = |u'_s\rangle + |u'_{s^*}\rangle .$$

Atunci, considerând

$$|v_s\rangle + |v_{s^*}\rangle = |0\rangle ,$$

cu

$$|u_s\rangle - |u'_s\rangle = |v_s\rangle \in \mathcal{S} ,$$

obţinem relaţiile:

$$\langle v_s|v_s\rangle + \underbrace{\langle v_s|v_{s^*}\rangle}_{0} = 0 \Rightarrow |v_s\rangle = |0\rangle ,$$

adică

$$|u_s\rangle = |u'_s\rangle .$$

q.e.d.

Dacă pentru orice vector $|u\rangle \in \mathcal{H}$ avem o relaţie de forma

$$\hat{P}_s|u\rangle = |u_s\rangle , \tag{4.42}$$

atunci $\hat{P}_s$ se numeşte *operatorul de proiecţie* (*proiector*) pe subspaţiul $\mathcal{S}$ şi are următoarele proprietăţi:

(i) *operatorul $\hat{P}_s$ este hermitic*, adică

$$\hat{P}_s^\dagger = \hat{P}_s , \tag{4.43}$$

şi *idempotent*, adică

$$\hat{P}_s^2 = \hat{P}_s . \tag{4.44}$$

Demonstraţiile acestor proprietăţi rezultă din următoarele relaţii:

$$\langle u|\hat{P}_s^\dagger|v\rangle = \langle v|\hat{P}_s|u\rangle^* = \langle v|u_s\rangle^* = \langle u_s|v\rangle =$$
$$= \langle u_s|\left(|v_s\rangle + |v_{s^*}\rangle\right) = \langle u_s|v_s\rangle = \left(\langle u_s| + \langle u_{s^*}|\right)|v_s\rangle = \langle u|\hat{P}_s|v\rangle$$

şi

$$\hat{P}_s^2|u\rangle = \hat{P}_s\left(\hat{P}_s|u\rangle\right) = \hat{P}_s|u_s\rangle = |u_s\rangle = \hat{P}_s|u\rangle .$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(ii) Acceptăm fără demonstraţie că *orice operator hermitic şi idempotent este proiector.*

(iii) Valorile şi vectorii proprii ai proiectorilor se pot deduce din ecuaţia de vectori şi valori proprii

$$\hat{P}_s|p\rangle = p|p\rangle$$

al cărei pătrat,

$$\hat{P}_s^2|p\rangle = p\,\hat{P}_s|p\rangle = p^2|p\rangle\,,$$

implică *valorile proprii* (datorită relaţiei (4.44))

$$p = 1 \;\;,\;\; p = 0 \tag{4.45}$$

şi *vectorii proprii* $|p\rangle \in \mathcal{S}$, pentru $p = 1$, şi $|p\rangle \in \mathcal{S}^*$, pentru $p = 0$.

(iv) Pentru proiectorul P_s este valabilă relaţia

$$\langle u|P_s|u\rangle = \langle u|u_s\rangle = (\langle u_s| + \langle u_{s^*}|)\,|u_s\rangle = \langle u_s|u_s\rangle\,,$$

din care, ţinând cont de inegalitatea

$$0 \leq \langle u_s|u_s\rangle \leq \langle u_s|u_s\rangle + \langle u_{s^*}|u_{s^*}\rangle = \langle u|u\rangle\,,$$

rezultă proprietatea

$$0 \leq \langle u|P_s|u\rangle \leq \langle u|u\rangle\,. \tag{4.46}$$

Natural, avem

$$\langle u|P_s|u\rangle = \begin{cases} \langle u|u\rangle & \text{pentru} \quad |u\rangle \in \mathcal{S} \\ 0 & \text{pentru} \quad |u\rangle \in \mathcal{S}^*\,. \end{cases} \tag{4.47}$$

4.2.1 Exemple de proiectori

- Fie $|a\rangle$ un versor, adică $\langle a|a\rangle = 1$, şi $\mathcal{S}_a$ – subspaţiul monodimensional generat de acesta. Atunci, un vector $|u\rangle$ admite descompunerea

$$|u\rangle = |u_a\rangle + |u_{a^*}\rangle\,,$$

unde

$$|u_a\rangle = c|a\rangle\,,$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

cu

$$c = \langle a|u_a\rangle = \langle a|u\rangle - \underbrace{\langle a|u_{a^*}\rangle}_{0},$$

conduce la relaţia

$$|u_a\rangle = |a\rangle\langle a|u\rangle\,. \tag{4.48}$$

Aceasta pune în evidenţă proiectorul

$$\hat{P}_a = |a\rangle\langle a|\,, \tag{4.49}$$

satisfăcând proprietăţile (i), deoarece

$$\hat{P}_a^\dagger = (|a\rangle\langle a|)^\dagger = |a\rangle\langle a| = \hat{P}_a$$

şi

$$\hat{P}_a^2 = |a\rangle\overbrace{\langle a|a\rangle}^{1}\langle a| = \hat{P}_a\,.$$

- Fiind $\mathcal{S}$ subspaţiul cu baza $|1\rangle, |2\rangle, \ldots, |n\rangle$, atunci putem defini operatorul

$$\hat{P}_s = \sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i|\,, \tag{4.50}$$

care satisface proprietăţile (i), deoarece $\hat{P}_s^\dagger = \hat{P}_s$ şi

$$\hat{P}_s^2 = \sum_{i,k=1}^{n} |i\rangle\underbrace{\langle i|k\rangle}_{\delta_{ik}}\langle k| = \sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i| = \hat{P}_s\,,$$

deci este proiector. Pentru orice vector $|u\rangle$, este valabilă relaţia (4.41) de descompunere pe subspaţiile complementare, adică

$$|u\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle\langle i|u\rangle = \sum_{i=1}^{n} |i\rangle\langle i|u\rangle + \sum_{i=n+1}^{\infty} |i\rangle\langle i|u\rangle =$$
$$= |u_s\rangle + |u_{s^*}\rangle = \hat{P}_s|u\rangle + \hat{P}_{s^*}|u\rangle\,. \tag{4.51}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

4.2.2 Algebra proiectorilor

a) Pentru orice vector $|u\rangle$, descompunerea (4.51), adică

$$|u\rangle = \hat{P}_s|u\rangle + \hat{P}_{s^*}|u\rangle \equiv \hat{P}_s|u\rangle + \left(1 - \hat{P}_s\right)|u\rangle ,$$

ne conduce la următoarea relaţie între operatorii de proiecţie pe spaţii complementare:

$$\hat{P}_{s^*} = 1 - \hat{P}_s . \tag{4.52}$$

b) Fie două subspaţii, $\mathcal{S}_i$ şi $\mathcal{S}_j$, cu proiectorii $\hat{P}_i$ şi, respectiv, $\hat{P}_j$. Produsul acestora, notat cu $\hat{P}_{ij}$ şi definit ca

$$\hat{P}_{ij} = \hat{P}_i \hat{P}_j \tag{4.53}$$

este proiector dacă şi numai dacă $\left[\hat{P}_i\,,\,\hat{P}_j\right] = 0$.

Demonstraţie

Verificarea proprietăţii (4.43), adică

$$\hat{P}_{ij}^{\dagger} = \left(\hat{P}_i\hat{P}_j\right)^{\dagger} = \hat{P}_j\hat{P}_i = \hat{P}_{ij} = \hat{P}_i\hat{P}_j ,$$

implică relaţia de comutare $\left[\hat{P}_i\,,\,\hat{P}_j\right] = 0$. Proprietatea de idempotenţă $\hat{P}_{ij}^2 = \hat{P}_{ij}$, scrisă sub forma

$$\hat{P}_i\left(\hat{P}_j\hat{P}_i\right)\hat{P}_j = \hat{P}_i\hat{P}_j = \hat{P}_i\left(\hat{P}_i\hat{P}_j\right)\hat{P}_j ,$$

implică egalitatea celor două paranteze rotunde, adică comutativitatea celor doi proiectori.

q.e.d.

c) Dacă cele două subspaţii sunt ortogonale, $\mathcal{S}_i \perp \mathcal{S}_j$, atunci proiectorii satisfac relaţia

$$\hat{P}_{ij} = \hat{P}_i\hat{P}_j = 0 , \tag{4.54}$$

şi se numesc *ortogonali.*

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

d) Suma proiectorilor $\hat{P}_i$, $\hat{P}_j$, $\hat{P}_k$, ... pe subspaţiile $\mathcal{S}_i$, $\mathcal{S}_j$, $\mathcal{S}_k$, ..., este proiector dacă şi numai dacă proiectorii care o compun sunt doi câte doi ortogonali.

Demonstraţie

Suma a doi proiectori, notată cu

$$\hat{P} \equiv \hat{P}_{i+j} = \hat{P}_i + \hat{P}_j \,, \tag{4.55}$$

este întotdeauna hermitică, adică $\hat{P}^\dagger = \hat{P}$. Satisfacerea proprietăţii de idempotenţă, $\hat{P}^2 = \hat{P}$, adică

$$\underbrace{\hat{P}_i^2}_{\hat{P}_i} + \hat{P}_i\hat{P}_j + \hat{P}_j\hat{P}_i + \underbrace{\hat{P}_j^2}_{\hat{P}_j} = \hat{P}_i + \hat{P}_j \,,$$

ne conduce la anticomutativitatea celor doi operatori,

$$\hat{P}_i\hat{P}_j + \hat{P}_j\hat{P}_i = 0 \,.$$

Înmulţind această relaţie din stânga, respectiv din dreapta, cu $\hat{P}_i$ avem

$$\begin{aligned} \hat{P}_i\hat{P}_i\hat{P}_j + \hat{P}_i\hat{P}_j\hat{P}_i &= 0 \\ \hat{P}_i\hat{P}_j\hat{P}_i + \hat{P}_j\hat{P}_i\hat{P}_i &= 0 \end{aligned}$$

şi, aplicând proprietatea (4.44) operatorilor $\hat{P}_i$ şi $\hat{P}_j$, rezultă

$$\begin{aligned} \hat{P}_i\hat{P}_j + \hat{P}_i\hat{P}_j\hat{P}_i &= 0 \\ \hat{P}_i\hat{P}_j\hat{P}_i + \hat{P}_j\hat{P}_i &= 0 \,, \end{aligned}$$

de unde, prin scădere, obţinem

$$\hat{P}_i\hat{P}_j - \hat{P}_j\hat{P}_i = 0$$

care, împreună cu relaţia de anticomutare $\hat{P}_i\hat{P}_j + \hat{P}_j\hat{P}_i = 0$, implică ortogonalitatea celor doi proiectori, adică $\hat{P}_i\,\hat{P}_j = 0$.

q.e.d.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Proiectorul pe întreg spaţiul $\mathcal{H}$, notat cu $\hat{P}_H$ şi satisfăcând relaţia

$$\hat{P}_H|u\rangle = |u\rangle\,, \quad (\forall)\,|u\rangle \in \mathcal{H}\,,$$

este identic cu operatorul unitar, adică $\hat{P}_H = 1$, şi satisface relaţia (4.49), adică

$$\hat{P}_H = \sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle\langle i|\,,$$

ceea ce conduce la relaţia uzuală de închidere

$$\sum_{i=1}^{\infty} |i\rangle\langle i| = 1\,. \tag{4.56}$$

4.3 Teoria perturbaţiilor independente de timp. Cazul degenerat

Fie starea corespunzătoare nivelului energetic E_a^0, *degenerat* de f ori. Vectorii $|E_a^0\,\alpha\rangle$, cu $\alpha = 1, 2, \ldots, f$, formează o bază pentru subspaţiul $\mathcal{S}_a^0$. Vom nota cu $E_1, E_2, \ldots, E_g$ valorile proprii ale hamiltonianului perturbat pentru care

$$E_s \overset{\lambda\to 0}{\to} E_a^0\,, \text{ cu } s = 1, 2, \ldots, g\,. \tag{4.57}$$

Dacă stările corespunzătoare lui $E_1, E_2, \ldots, E_g$ sunt, respectiv, degenerate de $f_1, f_2, \ldots, f_g$ ori, corespunzându-le subspaţiile $\mathcal{S}_1, \mathcal{S}_2, \ldots, \mathcal{S}_g$, atunci avem relaţiile

$$\mathcal{S}_1 \oplus \mathcal{S}_2 \oplus \ldots \oplus \mathcal{S}_g = \mathcal{S}_a \overset{\lambda\to 0}{\to} \mathcal{S}_a^0 \tag{4.58}$$

şi

$$f_1 + f_2 + \ldots + f_g = f\,. \tag{4.59}$$

Fiind E_s o valoare proprie din şirul $E_1, \ldots, E_g$, ecuaţia

$$\hat{H}\,|\psi_s\rangle = E_s\,|\psi_s\rangle\,, \text{ cu } |\psi_s\rangle \overset{\lambda\to 0}{\to} |0\rangle \in \mathcal{S}_a^0 \tag{4.60}$$

pune în evidenţă faptul că starea $|0\rangle$ aparţine lui $\mathcal{S}_a^0$, adică

$$P_0|0\rangle = |0\rangle\,, \text{ unde } P_0 = \sum_{\alpha=1}^{f} |E_a^0\,\alpha\rangle\langle E_a^0\,\alpha|\,. \tag{4.61}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Pentru a determina, în acest caz (al stărilor degenerate), corecţia ε_1, înmulţim ecuaţia (4.10.b) cu $\langle E_a^0\,\alpha|$ şi, ţinând cont de anularea primului termen, deoarece

$$\langle E_a^0\,\alpha|\left(\hat{H}_0 - E_a^0\right) = 0\,,$$

obţinem relaţia

$$\langle E_a^0\,\alpha|\,(V - \varepsilon_1)\,|0\rangle = 0\,. \tag{4.62}$$

Aici, utilizăm expresia (4.61) a stării neperturbate şi obţinem

$$\sum_{\alpha'=1}^{f} \langle E_a^0\,\alpha|\,(V - \varepsilon_1)\,|E_a^0\,\alpha'\rangle\langle E_a^0\,\alpha'|0\rangle = 0\,,$$

adică

$$\sum_{\alpha'=1}^{f} (V_{\alpha\alpha'} - \varepsilon_1\,\delta_{\alpha\alpha'})\,\langle E_a^0\,\alpha'|0\rangle = 0\,, \tag{4.63}$$

unde am introdus notaţia

$$V_{\alpha\alpha'} = \langle E_a^0\,\alpha|V|E_a^0\,\alpha'\rangle\,. \tag{4.64}$$

Cele f ecuaţii, pentru $\alpha = 1, \ldots, f$, din sistemul omogen (4.63), au soluţii nebanale pentru necunoscutele $\{X_{\alpha'} = \langle E_a^0\,\alpha'|0\rangle\}_{\alpha'=\overline{1,f}}$, dacă este îndeplinită condiţia de anulare a determinantului:

$$\det\,(V_{\alpha\alpha'} - \varepsilon_1\,\delta_{\alpha\alpha'}) = 0\,. \tag{4.65}$$

Dacă $\varepsilon_1^{(1)}, \varepsilon_1^{(2)}, \ldots, \varepsilon_1^{(g)}$ sunt rădăcinile ecuaţiei de ordinul f, (4.65), fiecare având multiplicitatea $f_1, f_2, \ldots, f_g$, înseamnă că energiei perturbate, $E_s = E_a^0 + \lambda\varepsilon_s$, îi corespunde o stare de f_s ori degenerată. Dacă suntem în cazul particular în care

$$f_1 = f_2 = \ldots = f_g = 1\,, \tag{4.66}$$

adică, conform relaţiei (4.59), $f = g$, atunci degenerarea se ridică complet în prima aproximaţie. Dacă (4.65) are o singură rădăcină, de multiplicitate f, degenerarea nu se ridică deloc. În alte cazuri, degenerarea este ridicată parţial.

BCU CLUJ / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

4.4 Electronul în câmp magnetic omogen

Considerăm un electron situat într-un câmp magnetic de inducţie $\vec{B}$ şi potenţial vector $\vec{A}$, descris de hamiltonianul

$$\hat{H} = \frac{(\vec{P} - e\vec{A})^2}{2m} + U + U_{spin}\,, \tag{4.67}$$

unde $\vec{P}$ este operatorul impuls, $\vec{P} = \vec{p} + e\vec{A}$, pentru o particulă încărcată aflată în câmp electromagnetic, $U = U(\vec{r})$ depinde numai de coordonate,

$$U_{spin} = -\frac{e}{m}\vec{S}\cdot\vec{B} \tag{4.68}$$

este operatorul energiei potenţiale de interacţiune a momentului magnetic propriu al electronului cu câmpul magnetic exterior şi, pentru moment, $e = |e|$. Ecuaţia Schrödinger independentă de timp, (1.27), capătă forma explicită

$$\left[\frac{\vec{P}^{\,2}}{2m} - \frac{e}{m}\vec{P}\cdot\vec{A} + \frac{e^2}{2m}\vec{A}^{\,2} + U - \frac{e}{m}\vec{S}\cdot\vec{B}\right]\psi = E\psi\,. \tag{4.69}$$

În cazul unui *câmp magnetic omogen*, pentru care potenţialul vector poate fi scris ca

$$\vec{A} = \frac{1}{2}\vec{B}\times\vec{r}\,, \tag{4.70}$$

ecuaţia (4.69) devine

$$\left[\frac{\vec{P}^{\,2}}{2m} - \frac{e}{2m}\vec{P}\cdot(\vec{B}\times\vec{r}) - \frac{e}{m}\vec{S}\cdot\vec{B} + \frac{e^2}{8m}(\vec{B}\times\vec{r})^{\,2} + U\right]\psi = E\psi\,. \tag{4.71}$$

Utilizând proprietăţile produsului mixt, putem scrie $\vec{P}\cdot(\vec{B}\times\vec{r}) = \vec{B}\cdot(\vec{r}\times\vec{P}) = \vec{B}\cdot\vec{L}$ şi obţinem *ecuaţia lui Pauli* pentru un electron cu momentul cinetic orbital $\vec{L}$ şi spinul $\vec{S}$, în câmp magnetic omogen, de forma:

$$\left[\frac{\vec{P}^{\,2}}{2m} - \frac{e}{2m}\vec{L}\cdot\vec{B} - \frac{e}{m}\vec{S}\cdot\vec{B} + \frac{e^2}{8m}(\vec{B}\times\vec{r})^{\,2} + U\right]\psi = E\psi\,. \tag{4.72}$$

Analizând (4.72), observăm, pe lângă hamiltonianul neperturbat $\hat{H}_0 = \vec{P}^{\,2}/(2m) - U$, prezenţa perturbaţiei

$$\begin{aligned} V &= -\frac{e}{2m}\vec{L}\cdot\vec{B} - \frac{e}{m}\vec{S}\cdot\vec{B} + \frac{e^2}{8m}(\vec{B}\times\vec{r})^{\,2} = \\ &= -\frac{e}{2m}\left(\vec{L} + 2\vec{S}\right)\cdot\vec{B} + \frac{e^2}{8m}(\vec{B}\times\vec{r})^{\,2}\,. \end{aligned} \tag{4.73}$$

BCU CLUJ CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

În continuare, vom considera următoarele două cazuri particulare:

4.4.1 Câmpul magnetic slab. Efectul Zeeman

Pentru un câmp magnetic exterior slab, putem neglija termenul ce conţine $\vec{B}^2$ şi rămânem cu perturbaţia

$$V' = -\frac{e}{2m}\left(\vec{L}+2\vec{S}\right)\cdot\vec{B} = -\frac{e}{2m}\left(\vec{J}+\vec{S}\right)\cdot\vec{B}, \tag{4.74}$$

în care am pus în evidenţă cuplajul spin–orbită, prin introducerea operatorului moment cinetic total al electronului,

$$\vec{J} = \vec{L}+\vec{S}\,. \tag{4.75}$$

Presupunând câmpul magnetic orientat după axa Oz, adică

$$\vec{B} = (0,\,0,\,B)\,, \tag{4.76}$$

perturbaţia (4.74) devine

$$V' = -\frac{e}{2m}\left(\vec{J}+\vec{S}\right)\cdot\vec{B} = -\frac{eB}{2m}\left(J_z+S_z\right). \tag{4.77}$$

Observăm că (4.77) comută cu J_z şi astfel, pentru a determina corecţia de ordin unu a nivelelor energetice, va fi suficient să calculăm elementele diagonale ale acestui operator. În manieră directă, acest lucru nu este foarte simplu deoarece S_z nu comută cu J^2, care este una dintre observabilele fundamentale ale sistemului, în prezenţa cuplajului $\vec{L}\cdot\vec{S}$. Deoarece numărul cuantic m_j al proiecţiei J_z ia $2j+1$ valori, rezultă că nivelele energetice corespunzătoare acestui hamiltonian vor fi degenerate doar de $2j+1$ ori, nedepinzând de m_ℓ şi m_s. În consecinţă, se impune aplicarea teoriei perturbaţiilor în cazul degenerat. Pentru a evita aceste dificultăţi, vom defini momentul magnetic total al electronului prin relaţia

$$\vec{\mu}_j = g_j\,\mu_B\,\vec{J} = g_\ell\,\mu_B\,\vec{L} + g_s\,\mu_B\,\vec{S}\,, \tag{4.78}$$

unde g_j este factorul Landé, $g_\ell = 1$, $g_s = 2$ sunt factorii giromagnetici (simpli) corespunzători *mişcărilor* orbitale şi de spin ale electronului, iar

$$\mu_B = \frac{e}{2m}\,, \tag{4.79}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

pentru unităţi naturale, în care $\hbar = 1$, este magnetonul Bohr–Procopiu. Astfel, avem relaţiile esenţiale:

$$\begin{aligned} &(a) \quad \vec{J} = \vec{L} + \vec{S} \\ &(b) \quad g_j \vec{J} = \vec{L} + 2\vec{S}, \end{aligned} \tag{4.80}$$

pe care le vom utiliza în continuare pentru a deduce expresia factorului Landé. Ridicând la pătrat pe (4.80.a), adică

$$\vec{J} \cdot \vec{J} = J^2 = \left(\vec{L} + \vec{S}\right) \cdot \left(\vec{L} + \vec{S}\right) = L^2 + S^2 + 2\vec{L} \cdot \vec{S},$$

rezultă

$$j(j+1) = \ell(\ell+1) + s(s+1) + 2\langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle$$

de unde obţinem

$$\langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle = \frac{1}{2}\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \right]. \tag{4.81}$$

Înmulţind scalar cu $\vec{J}$ pe (4.80.b), din dreapta, şi mediind pe stările cuantice corespunzătoare, avem relaţia

$$\begin{aligned} g_j \vec{J} \cdot \vec{J} = g_j\, j(j+1) &= (\vec{L} + 2\vec{S}) \cdot (\vec{L} + \vec{S}) = \vec{L}^{\,2} + 3\langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle + 2\vec{S}^{\,2} = \\ &= \ell(\ell+1) + \frac{3}{2} + 3\langle \vec{L} \cdot \vec{S} \rangle \end{aligned}$$

care, prin înlocuirea lui (4.81), ne conduce la:

$$\begin{aligned} g_j &= [j(j+1)]^{-1} \left\{ \ell(\ell+1) + \frac{3}{2} + \frac{3}{2}\left[j(j+1) - \ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \right] \right\} = \\ &= [j(j+1)]^{-1} \left\{ \frac{3}{2} j(j+1) - \frac{1}{2}\left[\ell(\ell+1) - \frac{3}{4} \right] \right\}, \end{aligned}$$

adică la expresia uzuală a *factorului Landé*:

$$g_j = \frac{3}{2} - \frac{1}{2} \frac{\ell(\ell+1) - 3/4}{j(j+1)}. \tag{4.82}$$

Deoarece j este cuprins între $|\ell - s|$ şi $\ell + s$, variind din 1 în 1, se observă că, în cazul analizat, j are numai două valori posibile pentru $\ell \in \mathbf{N}^*$,

$$j_{min} = \left| \ell - \frac{1}{2} \right|, \quad j_{max} = \ell + \frac{1}{2}. \tag{4.83}$$

BCU IAŞI CENTRALA UNIVERSITY LIBRARY

Evident, pentru $\ell = 0$, avem:

$$g_j|_{\ell=0} = \frac{3}{2} - \frac{1}{2}\frac{-3/4}{\frac{1}{2}\cdot\frac{3}{2}} = \frac{3}{2} + \frac{1}{2} \equiv 2 = g_s \,.$$

Avem acum toate elementele necesare pentru a determina spectrul energetic al electronului introdus într-un câmp magnetic slab, constant şi omogen, pentru care energia potenţială de interacţiune cu câmpul magnetic este mult mai mică decât energia interacţiunii spin–orbită (vezi paragraful 6.7). În acest caz, cuplajul spin–orbită funcţionează şi momentul magnetic total al electronului este (4.78) sau, dacă ţinem cont de sarcina elementară negativă a electronului, $e = -|e|$,

$$\vec{\mu}_J = -\, g_j\, \mu_B \vec{J} \,.$$

Energia potenţială de interacţiune cu câmpul magnetic, după cum rezultă din (4.80) şi prima dintre relaţiile (4.74), devine

$$W^{mag} = -\,\vec{\mu}_J \cdot \vec{B} = g_j\, \mu_B (\vec{J}\cdot\vec{B}) \,, \tag{4.84}$$

adică, în cazul (4.76), când axa Oz este orientată după direcţia şi sensul inducţiei, poate fi scrisă sub forma

$$W^{mag}_{m_j} = g_j\, \mu_B\, B\, m_j \,, \tag{4.85}$$

unde numărul cuantic magnetic, m_j, ia toate cele $2j+1$ valori, de la $-j$, la j, din 1 în 1. Astfel, *despicarea energetică* între două niveluri *vecine*, $|\Delta m_j| = 1$, depinde numai de factorul Landé şi de produsul

$$\mu_B\, B = \frac{eB}{2m} \,,$$

adică

$$\Delta W^{mag}_{m_j} = g_j\, \mu_B\, B = \frac{eB}{2m}\, g_j \,. \tag{4.86}$$

Prin urmare, pentru *fiecare* valoare a lui j, în acest caz $j = |\ell - 1/2|$ şi $j = \ell + 1/2$, se obţin câte $2j$ *linii spectrale de tranziţie* Zeeman, toate de aceeaşi pulsaţie

$$\omega_j = \frac{eB}{2m}\, g_j \,, \tag{4.87}$$

la $|\Delta m_j| = 1$. De exemplu, pentru $\ell = 2$ (orbital d), vom avea $j = 3/2$ şi $j = 5/2$. Există deci doar două grupe:

BCUIASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

G1. Pentru $j = 3/2$, adică

$$m_j = -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2},$$

vom avea 3 tranziţii, cu $|\Delta m|_{3/2} = 1$, de pulsaţie

$$\omega_{\frac{3}{2}} = \frac{eB}{2m} g_{\frac{3}{2}}\left(2, \frac{1}{2}\right).$$

G2. Pentru $j = 5/2$, adică

$$m_j = -\frac{5}{2}, -\frac{3}{2}, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2},$$

sunt posibile 5 tranziţii, cu $|\Delta m|_{5/2} = 1$, cu pulsaţia

$$\omega_{\frac{5}{2}} = \frac{eB}{2m} g_{\frac{5}{2}}\left(2, \frac{1}{2}\right).$$

4.4.2 Câmpul magnetic puternic. Proprietăţile diamagnetice ale substanţei

În cazul în care energia de interacţiune a electronului cu câmpul magnetic exterior este mult mai mare decât energia cuplajului spin–orbită (*efectul Paschen–Back*), operatorul perturbaţie (4.74), pentru câmpul magnetic omogen (4.76), este de forma

$$V' = -\frac{e}{2m}(L_z + 2S_z)B. \tag{4.88}$$

Cu funcţiile de undă neperturbate $|0\rangle = |\ell\, s\, m_\ell\, m_s\rangle = |\ell m_\ell\rangle|s m_s\rangle$ se poate estima corecţia de ordin unu a nivelului energetic caracterizat de numerele cuantice ℓ şi s ca fiind

$$W_{m_\ell, m_s} = -\frac{eB}{2m}(m_\ell + 2m_s). \tag{4.89}$$

Acelaşi raţionament este valabil şi în cazul unui atom cu n electroni, cu momentul cinetic orbital $\vec{L} = \sum_{k=1}^{n} \vec{L}_k$ şi spinul $\vec{S} = \sum_{k=1}^{n} \vec{S}_k$. Funcţiile de undă neperturbate fiind, în acest caz, $|LSM_L M_S\rangle = |LM_L\rangle|SM_S\rangle$, corecţia de ordin unu a unui nivel energetic, caracterizat de numerele cuantice L şi S este

$$W_{M_L, M_S} = -\frac{eB}{2m}(M_L + 2M_S) \tag{4.90}$$

BUCHAREST CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi poate lua atât valori pozitive cât şi negative. Se observă că degenerarea iniţială este ridicată de câmpul magnetic şi se poate arăta că termenul de perturbaţie (4.88) este responsabil de proprietăţile *paramagnetice* ale substanţei [9].

Un caz aparte îl constitituie stările caracterizate de $L = 0$ şi $S = 0$, pentru care (4.90) se anulează. Acum, pentru a explica deplasarea nivelului energetic, vom lua în considerare, în perturbaţia (4.73), termenul în $\vec{B}^2$, adică

$$V'' = \frac{e^2}{8m} \sum_{k=1}^{n} \left(\vec{B} \times \vec{r}_k \right)^2 = \frac{e^2}{8m} \sum_{k=1}^{n} B^2 r_k^2 \sin^2 \theta_k \,, \tag{4.91}$$

pentru $\vec{B} = (0, 0, B)$. Funcţia de undă a sistemului având simetrie sferică, corecţia de energie va fi dată de valoarea medie a lui (4.91), adică

$$\begin{aligned} \Delta W &= \frac{e^2 B^2}{8m} \sum_{k=1}^{n} \langle r_k^2 \rangle \langle \sin^2 \theta_k \rangle = \\ &= \frac{e^2 B^2}{8m} \frac{2}{3} \sum_{k=1}^{n} \langle r_k^2 \rangle = \frac{e^2 B^2}{12m} \sum_{k=1}^{n} \langle r_k^2 \rangle \,. \end{aligned} \tag{4.92}$$

Calculul momentului magnetic total,

$$\mathrm{M} = -\frac{\partial \Delta W}{\partial B} = -\frac{e^2 B}{6m} \sum_{k=1}^{n} \langle r_k^2 \rangle \,, \tag{4.93}$$

pune în evidenţă o susceptibilitate negativă,

$$\chi = \frac{\mathrm{M}}{B} = -\frac{e^2}{6m} \sum_{k=1}^{n} \langle r_k^2 \rangle \,, \tag{4.94}$$

ce caracterizează proprietăţile diamagnetice ale substanţei. Deci, în absenţa proprietăţilor paramagnetice, în stările în care momentul cinetic orbital total şi spinul total al atomului sunt nule, termenul (4.91) este responsabil de proprietăţile diamagnetice ale atomului.

4.5 Metoda variaţională

Teorema 1 *Vectorii care lasă staţionară funcţionala*

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} \tag{4.95}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

sunt vectorii proprii ai spectrului discret al lui $\hat{H}$ şi reciproc. Valoarea proprie corespunzătoare este valoarea staţionară a lui $E[\psi]$.

Demonstraţie

Din definiţia (4.95) a funcţionalei $E[\psi]$, scrisă sub forma

$$\langle\psi|\psi\rangle\, E = \langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle\,,$$

rezultă variaţia

$$\langle\psi|\psi\rangle\,\delta E + E\,\delta\langle\psi|\psi\rangle = \delta\langle\psi|\hat{H}|\psi\rangle\,,$$

din care se obţine relaţia

$$\langle\psi|\psi\rangle\,\delta E = \langle\delta\psi|\hat{H}|\psi\rangle + \langle\psi|\hat{H}|\delta\psi\rangle - \langle\delta\psi|E|\psi\rangle - \langle\psi|E|\delta\psi\rangle\,,$$

adică

$$\langle\psi|\psi\rangle\,\delta E = \langle\delta\psi|\left(\hat{H}-E\right)|\psi\rangle + \langle\psi|\left(\hat{H}-E\right)|\delta\psi\rangle\,. \tag{4.96}$$

- **Suficienţa condiţiei**
  Dacă $\delta E = 0$, atunci, din (4.96), rezultă

$$\langle\delta\psi|\left(\hat{H}-E\right)|\psi\rangle + \langle\psi|\left(\hat{H}-E\right)|\delta\psi\rangle = 0, \tag{4.97}$$

şi, cum $\delta\psi$ este arbitrar, înlocuim pe $\delta\psi$ cu $i\delta\psi$ şi găsim

$$\langle i\,\delta\psi|\left(\hat{H}-E\right)|\psi\rangle + \langle\psi|\left(\hat{H}-E\right)|i\,\delta\psi\rangle = 0\,.$$

Îl scoatem pe i în faţa produsului scalar şi, simplificând cu i, obţinem

$$-\langle\delta\psi|\left(\hat{H}-E\right)|\psi\rangle + \langle\psi|\left(\hat{H}-E\right)|\delta\psi\rangle = 0\,. \tag{4.98}$$

Din (4.97) şi (4.98), rezultă relaţia

$$\langle\delta\psi|\left(\hat{H}-E\right)|\psi\rangle = 0\,, \tag{4.99}$$

şi, cum $\langle\delta\psi|$ este arbitrar, avem

$$\left(\hat{H}-E\right)|\psi\rangle = 0\,, \tag{4.100}$$

adică ecuaţia de vectori şi valori proprii a operatorului $\hat{H}$

$$\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle\,.$$

BCU IASI CENTRALA UNIVERSITY LIBRARY

- **Necesitatea condiţiei**
  Relaţia (4.100) şi conjugata sa hermitică, adică

$$\langle\psi|\left(\hat{H}-E\right)=0\,,$$

ne conduc la

$$\langle\delta\psi|\left(\hat{H}-E\right)|\psi\rangle=0$$

şi

$$\langle\psi|\left(\hat{H}-E\right)|\delta\psi\rangle=0$$

care, prin înlocuire în (4.96), implică $\delta E=0$.

q.e.d.

Metoda variaţională, ca metodă de perturbaţie, constă în aceea că, din spaţiul Hilbert, se extrage, în mod corespunzător, o familie de vectori, depinzând de k parametri, adică $|\psi(\vec{r},t;\lambda_1,\ldots,\lambda_k)\rangle$. Acum, funcţionala (4.95) se reduce la o funcţie de aceşti parametri, deci $E=(\lambda_1,\ldots,\lambda_k)$. Prima condiţie de extrem, anume $\partial E/\partial\lambda_i$, $i=\overline{1,k}$, conduce la determinarea parametrilor λ_i şi, implicit, la vectorii şi valorile proprii ale hamiltonianului. Metoda este aproximativă, deoarece nu s-a luat în considerare întregul spaţiu Hilbert, ci numai o submulţime de elemente.

4.6 Perturbaţii dependente de timp

Fie $\hat{V}(x,t)$ un operator de perturbaţie, de tip potenţial, dependent atât de coordonatele x, cât şi de momentul t când acţionează perturbaţia. Ca şi în cazul anterior, $\hat{H}_0$ este hamiltonianul neperturbat, cu setul complet de vectori proprii ortonormali $\{|n\rangle\}_{n\in\mathbf{N}}$, adică

$$\hat{H}_0|n\rangle=E_n|n\rangle \tag{4.101}$$

şi

$$\langle n'|n\rangle=\delta_{n'n}\,,$$

formând o bază în spaţiul Hilbert al stărilor sistemului. Hamiltonianul sistemului perturbat devine (metoda nu necesită explicitarea unui parametru mic, λ)

$$\hat{H}=\hat{H}_0+\hat{V}(x,t)\,. \tag{4.102}$$

BCU IAŞI CENTRU DE UNIVERSITY LIBRARY

Stările posibile $|\psi\rangle$, descrise prin superpoziţia

$$|\psi\rangle = \sum_m c_m(t)\, e^{-iE_m t}\, |m\rangle\,, \tag{4.103}$$

(pentru simplificare, vom utiliza unităţi în care $\hbar = 1$) cu coeficienţii de amplitudine – *variabili în timp* – $c_m(t)$, vor fi soluţii ale ecuaţiei Schrödinger dependente de timp adică, în mod concret, ale ecuaţiei

$$\left[\hat{H}_0 + \hat{V}(x,t)\right] \sum_m c_m(t)\, e^{-iE_m t}\, |m\rangle \; =$$

$$= i\left[\sum_m \frac{dc_m}{dt}\, e^{-iE_m t}|m\rangle - i\sum_m c_m(t)\, E_m\, e^{-iE_m t}\, |m\rangle\right]. \tag{4.104}$$

Ţinând cont de (4.101), ecuaţia (4.104) devine

$$\sum_m c_m(t)\, E_m\, e^{-iE_m t}\, |m\rangle + \sum_m \hat{V}(x,t)\, |m\rangle\, e^{-iE_m t}\, c_m(t) =$$

$$= \sum_m c_m(t)\, E_m\, e^{-iE_m t}\, |m\rangle + i\sum_m \frac{dc_m}{dt}\, e^{-iE_m t}\, |m\rangle\,,$$

adică, în final, obţinem, *proiectând* pe o stare oarecare $e^{iE_n t}\langle n|$, *ecuaţia de evoluţie* a amplitudinilor $\{c_n(t)\}_{n\in\mathbf{N}}$, dată sub forma sistemului diferenţial liniar infinit (ca număr de funcţii necunoscute) de ordinul I:

$$\frac{dc_n}{dt} = -i\sum_m e^{iE_n t}\, \langle n|\hat{V}(x,t)|m\rangle\, e^{-iE_m t}\, c_m(t)\,. \tag{4.105}$$

Notând

$$E_n - E_m \equiv \omega_{nm}\,, \tag{4.106}$$

vom obţine elementele

$$V_{nm}(t)\, e^{i\omega_{nm}t} = e^{iE_n t}\, \langle n|\hat{V}(x,t)|m\rangle\, e^{-iE_m t} \tag{4.107}$$

ale *matricei de perturbaţie*, care sunt independente de x, datorită integralei $\langle n|\hat{V}(x,t)|m\rangle$ care se face peste *toate* coordonatele x, din spaţiul de configuraţie. Aşadar, obţinem forma echivalentă a sistemului de evoluţie ca fiind

$$\frac{dc_n}{dt} = -i\sum_m e^{i\omega_{nm}t}\, V_{nm}(t)\, c_m(t) \tag{4.108}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

care, datorită numărului infinit de linii şi coloane ale matricei de perturbaţie $V(t) = (V_{nm}(t))$, este rareori exact integrabil. În principiu, obţinerea unei soluţii în formă închisă este, practic, imposibilă. De aceea, se utilizează metode recurente de aproximare a soluţiei, două dintre cele mai cunoscute urmând să fie prezentate în cele ce urmează.

4.6.1 Metoda iterativă

Această metodă afirmă că putem calcula, pas cu pas, *corecţiile de ordin k*, notate cu $\{\overset{(k)}{c_n}(t)\}_{n\in\mathbb{N}}$, pornind de la o stare de ordin zero, $\overset{(0)}{c_m}(t)$, fizic rezonabilă, de exemplu o stare iniţială neperturbată, l, adică

$$\overset{(0)}{c_m}(t) = \delta_{ml}\,.$$

Astfel, corecţiile de ordin k vor fi legate de cele de ordin $k-1$ prin sistemul

$$\frac{d\,\overset{(k)}{c_n}}{dt} = -i\sum_m e^{i\omega_{nm}t}\,V_{nm}(t)\;\overset{(k-1)}{c_m}(t)\,, \tag{4.109}$$

astfel încât, pornind de la $\overset{(0)}{c_m}(t)$, putem obţine toate celelalte corecţii, $\overset{(1)}{c_m}(t)$, $\overset{(2)}{c_m}(t)$; ..., iterativ, până la ordinul dorit (aproximaţii succesive).

De exemplu, pentru *corecţiile de ordinul I*, obligatoriu de analizat, sistemul (4.109) devine

$$\frac{d\,\overset{(1)}{c_n}}{dt} = -i\sum_m e^{i\omega_{nm}t}\,V_{nm}(t)\;\overset{(0)}{c_m}(t)\,, \tag{4.110}$$

şi avem relaţia evidentă

$$\overset{(1)}{c_n}(t) = -i\sum_m \int_{t_0}^{t} dt\, e^{i\omega_{nm}t}\,V_{nm}(t)\;\overset{(0)}{c_m}(t)\,, \tag{4.111}$$

care, cu $\overset{(0)}{c_m}(t) = \delta_{ml}$, ne conduce la

$$\overset{(1)}{c_n}(t) = -i\int_{t_0}^{t} dt'\, e^{i\omega_{nl}t'}\,V_{nl}(t')\,. \tag{4.112}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Această expresie constituie practic *amplitudinea de tranziţie*

$$\mathcal{A}_{nl}(t) = \overset{(1)}{c}_n(t), \tag{4.113}$$

a sistemului, din starea l în starea n, sub acţiunea perturbaţiei $\hat{V}(x,t)$. *Probabilitatea tranziţiei* corespunzătoare se va exprima, simplu, prin formula

$$\mathcal{P}_{nl}(t) = |\mathcal{A}_{nl}(t)|^2 . \tag{4.114}$$

În ceea ce priveşte *corecţia de ordin II*, relaţia (4.111) devine

$$\overset{(2)}{c}_n(t) = -i \sum_m \int_{t_0}^{t} dt\, e^{i\omega_{nm}t}\, V_{nm}(t)\, \overset{(1)}{c}_m(t), \tag{4.115}$$

unde efectuăm înlocuirea

$$\overset{(1)}{c}_m(t) = -i \int_{t_0}^{t} dt'\, e^{i\omega_{mp}t'}\, V_{mp}(t'),$$

şi obţinem expresia

$$\overset{(2)}{c}_n(t) = -\sum_m \int_{t_0}^{t} dt''\, e^{i\omega_{nm}t''}\, V_{nm}(t'') \int_{t_0}^{t''} dt'\, e^{i\omega_{ml}t'}\, V_{ml}(t'),$$

adică

$$\overset{(2)}{c}_n(t) = -\int_{t_0}^{t}\int_{t_0}^{t''} dt''\, dt'\, e^{i\omega_{nm}t''}\, V_{nm}(t'')\, V_{ml}(t')\, e^{i\omega_{ml}t'} , \tag{4.116}$$

a amplitudinii de tranziţie, de ordinul II, din starea l în starea n, prin intermediul tuturor stărilor intermediare m (suma după m se subînţelege).

Pentru corecţiile superioare, se procedează analog, înlocuind $\overset{(2)}{c}_m(t)$ în ecuaţia pentru $\overset{(3)}{c}_n(t)$ şi tot aşa, succesiv, până la ordinul dorit k.

Precizăm că o *tranziţie permisă* este caracterizată printr-o amplitudine de tranziţie diferită de zero, într-un ordin dat, celelalte tranziţii, de amplitudini nule în ordinul de aproximaţie corespunzător, fiind denumite *tranziţii interzise*.

FCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

4.6.2 Metoda soluţiei formale

Deşi are această denumire, soluţia la care ne conduce este matematic corectă, ea stând la baza, nu numai a tratării unitare a teoriei perturbaţiilor nestaţionare, dar şi a descrierii concrete a *formalismului matricei S de împrăştiere*, din Teoria Cuantică a Câmpurilor. Adjectivul *formală* provine din interpretarea *unidimensională* a sistemului matriceal diferenţial de ordinul I,

$$\frac{dc}{dt} = -iV\,c\,, \tag{4.117}$$

corespunzător ecuaţiei de evoluţie a amplitudinilor $\{c_n(t)\}_{n\in\mathbf{N}}$. Astfel, formal, se poate scrie relaţia

$$\frac{d}{dt}(\ln c) = -iW\,,\ \text{cu}\ W = \left(e^{i\omega_{nm}t}\,V_{nm}(t)\right)\,, \tag{4.118}$$

ceea ce implică soluţia generală – formal exactă –

$$c(t) = e^{-i\int_{t_0}^{t} dt\,W(t)}\,c(t_0)\,.$$

Cum scalarea momentului iniţial este arbitrară, putem lua $t_0 = 0$ şi obţinem relaţia

$$c(t) = e^{-i\int_{0}^{t} dt\,W(t)}\,c(0) \tag{4.119}$$

ca soluţie pentru matricea unicoloană

$$c(t) = \begin{pmatrix} \vdots \\ c_n(t) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

a amplitudinilor la momentul t, pornind de la cea a amplitudinilor iniţiale, cunoscute,

$$c(0) = \begin{pmatrix} \vdots \\ c_n(0) \\ \vdots \end{pmatrix}.$$

Evaluarea exponenţialei se face prin reprezentarea tayloriană a acesteia, adică

$$\exp\left(-i\int_0^t dt\,W(t)\right) = \sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!}\left[-i\int_0^t dt\,W(t)\right]^k\,, \tag{4.120}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

unde $\left[-i\int_0^t dt\, W(t)\right]^k$ reprezintă produsul, de k ori, al matricei $-i\int_0^t dt\, W(t)$ cu ea însăşi. Comparând acest rezultat cu cel oferit de *metoda iterativă* observăm că, până la factorul $1/k!$, există o asemănare frapantă, în sensul că indexul k reprezintă, de fapt, *ordinul* corecţiei

$$\overset{(k)}{c}(t) \approx \left[-i\int_0^t dt\, V(t)\, e^{i\omega t}\right]^k \overset{(0)}{c}(t)$$

a amplitudinii de tranziţie. Concret, avem relaţia

$$c(t) = \left[1 - i\int_0^t dt\, V(t)\, e^{i\omega t} - \frac{1}{2!}\left\{\int_0^t dt\, V(t)\, e^{i\omega t}\right\}^2 + \ldots\right] c(0)\,, \quad (4.121)$$

în care am pus în evidenţă atât expresia corecţiei de ordinul I ca fiind

$$\overset{(1)}{c}(t) = -i\left(\int dt\, V(t)\, e^{i\omega t}\right) c(0)\,, \quad (4.122)$$

adică (4.112), cât şi pe cea de ordinul II,

$$\overset{(2)}{c_n}(t) = -\frac{1}{2}\int_0^t dt'\, dt''\, V_{nm}(t')\, e^{i\omega_{nm}t'}\, V_{ml}(t'')\, e^{i\omega_{ml}t''} \quad (4.123)$$

şi aşa mai departe. Se poate demonstra, prin introducerea *produsului cronologic*, T (vezi cursurile de *Teoria Cuantică a Câmpurilor* [13, 35, 37]), că membrul drept al relaţiei (4.120) poate fi scris ca

$$\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-i)^k}{k!}\left\{\int_0^t dt\, W(t)\right\}^k = \sum_{k=0}^{\infty}(-i)^k\, \mathrm{T}\left[\left(\int_0^t dt\, W(t)\right)^k\right],$$

adică

$$\frac{(-i)^k}{k!}\left(\int dt\, W(t)\right)^k = (-i)^k\, \mathrm{T}\left[\left(\int_0^t dt\, W(t)\right)^k\right] =$$

$$= (-i)^k \int_{t_{k-1}}^t dt_{k-1}\int_{t_{k-2}}^{t_{k-1}} dt_{k-2}\ldots\int_0^{t_1} dt_0\, W(t_{k-1})\ldots W(t_0)\,, \quad (4.124)$$

ceea ce justifică echivalenţa celor două metode. Astfel, pentru corecţia de ordinul k la amplitudinea de tranziţie, din starea iniţială l în cea finală n, vom

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

avea expresia *ordonată cronologic*

$$\overset{(k)}{\mathcal{A}}_{nl}(t) = (-i)^k \int_{t_k}^{t} d\tau_k \int_{t_{k-1}}^{t_k} d\tau_{k-1} \dots$$
$$\dots \int_0^{t_1} d\tau_1 \, W_{nm_k}(\tau_k) \, W_{m_k m_{k-1}}(\tau_{k-1}) \dots W_{m_1 l}(\tau_1) , \qquad (4.125)$$

cu notaţia

$$W_{m_i m_{i-1}}(\tau_{i-1}) = V_{m_i m_{i-1}}(\tau_{i-1}) \exp\left(i\omega_{m_i m_{i-1}} \tau_{i-1}\right) . \qquad (4.126)$$

4.6.3 Excitarea atomilor cu lumină monocromatică

În acest paragraf, vom aplica *metoda iterativă* pentru calculul corecţiei de ordinul I şi a probabilităţii de tranziţie, în cazul atomilor excitaţi cu lumină monocromatică. Acţiunea esenţială este dată de componenta electrică a luminii care, datorită faptului că lungimea de undă λ este mult mai mare decât dimensiunea liniară a atomului, poate fi considerată dependentă numai de timp, variaţia spaţială a vectorului intensitate câmp electric putând fi neglijată. *Amplitudinea de tranziţie* (4.113, 112), cu energia potenţială

$$V = e\vec{E} \cdot \vec{r} = e\left(\vec{E}_0 \cdot \vec{r}\right) \sin \omega t , \qquad (4.127)$$

devine

$$\mathcal{A}_{ki} = -i \int_0^t V_{ki}(\tau) \, e^{i\omega_{ki}\tau} d\tau =$$
$$= -ie \left(E_0 \cdot \vec{r}\right)_{ki} \int_0^t \sin \omega\tau \, e^{i\omega_{ki}\tau} \, d\tau , \qquad (4.128)$$

iar probabilitatea de tranziţie, (4.114), capătă forma

$$\mathcal{P}(i \to k)^{(1)} = e^2 \left|\left(\vec{E}_0 \cdot \vec{r}\right)_{ki}\right|^2 \left| \int_0^t \sin \omega t \, e^{i\omega_{ki}\tau} d\tau \right|^2 , \qquad (4.129)$$

unde

$$\left(\vec{E}_0 \cdot \vec{r}\right)_{ki} = E_{0x} \, x_{ki} + E_{0y} \, y_{ki} + E_{0z} \, z_{ki} . \qquad (4.130)$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Integrala din (4.129) poate fi evaluată astfel:

$$\int_0^t \sin\omega\tau\, e^{i\omega_{ki}\tau}\, d\tau = \frac{1}{2i}\left\{\int_0^t \left(e^{i(\omega+\omega_{ki})\tau} - e^{i(-\omega+\omega_{ki})\tau}\right)\right\} =$$
$$= \frac{1}{2}\left(\frac{1-e^{i(\omega+\omega_{ki})t}}{\omega+\omega_{ki}} - \frac{1-e^{i(-\omega+\omega_{ki})t}}{\omega_{ki}-\omega}\right), \qquad (4.131)$$

punând în evidenţă următoarele două tranziţii de probabilitate mare:

- *absorbţia*, dacă $\omega_{ki} - \omega \approx 0 \;\Rightarrow\; E_k \approx E_i + \hbar\omega$;
- *emisia*, dacă $\omega_{ki} + \omega \approx 0 \;\Rightarrow\; E_k + \hbar\omega \approx E_i$.

În baza discuţiei din încheierea paragrafului 4.6.1, *tranziţia* este *permisă* dacă cel puţin un element matriceal din şirul x_{ki}, y_{ki}, z_{ki} este diferit de zero.

Reguli de selecţie

- **Oscilatorul**
  În cazul oscilatorului, elementul

$$x_{ki} = \langle k|x|i\rangle\,, \qquad (4.132)$$

  cu $|i\rangle$ dat de (1.108), adică

$$|i\rangle = C_i \exp\left(-\beta^2 x^2/2\right) H_i(\beta x)\,, \qquad (4.133)$$

  are expresia concretă

$$x_{ki} = C_k C_i \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta^2 x^2} H_k(\beta x)\, x\, H_i(\beta x)\, dx =$$
$$= \frac{C_k C_i}{\beta^2} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_k(\xi)\, \xi\, H_i(\xi)\, d\xi\,, \qquad (4.134)$$

  unde $\xi = \beta x$. Prin utilizarea relaţiei de recurenţă pentru polinoamele Hermite (vezi Anexa **A.1** şi [34])

$$\xi\, H_i(\xi) = \frac{1}{2}\left[H_{i+1}(\xi) + 2iH_{i-1}(\xi)\right], \qquad (4.135)$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

relaţia (4.134) devine

$$\begin{aligned} x_{ki} &= \frac{C_k C_i}{2\beta^2}\left\{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_k(\xi) H_{i+1}(\xi)\, d\xi + \right. \\ &+ \left. 2i\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\xi^2} H_k(\xi) H_{i-1}(\xi)\, d\xi\right\} = \\ &= \frac{1}{2\beta}\left\{C_k C_i \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta^2 x^2} H_k(\beta x)\, H_{i+1}(\beta x)\, dx + \right. \\ &+ \left. 2i\, C_k C_i \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\beta^2 x^2} H_k(\beta x)\, H_{i-1}(\beta x)\, dx\right\}, \end{aligned}$$

adică

$$x_{ki} = \frac{1}{2\beta}\left(\frac{C_i}{C_{i+1}}\,\delta_{k,i+1} + 2i\,\frac{C_i}{C_{i-1}}\,\delta_{k,i-1}\right). \tag{4.136}$$

Pentru a avea $x_{ki} \neq 0$, trebuie să fie îndeplinită condiţia $k = i \pm 1$, sau, notând numărul cuantic al oscilatorului cu n, trebuie să fie satisfăcută *regula de selecţie*

$$\Delta n = \pm 1\,. \tag{4.137}$$

- **Rotatorul**

În cazul rotatorului, stările indexate prin k şi i sunt date, respectiv, prin valorile numerelor cuantice $l'm'$ şi lm. Elementele

$$(\vec{r})_{ki} = (\vec{r})_{l'm';lm} = \int \left(Y_{l'}^{m'}\right)^* \vec{r}\, Y_l^m\, d\Omega\,, \tag{4.138}$$

cu Y_l^m având expresia (1.121) şi $\vec{r}$ exprimat în coordonate sferice, au forma concretă

$$\begin{aligned} x_{ki} &= x_{l'm';lm} = C_{l'}^{m'} C_l^m \times \\ &\times r\int_0^\pi P_{l'}^{m'}(\cos\theta)\sin\theta P_l^m(\cos\theta)\sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} \cos\varphi e^{i(m-m')\varphi} d\varphi \\ y_{ki} &= y_{l'm';lm} = C_{l'}^{m'} C_l^m \times \\ &\times r\int_0^\pi P_{l'}^{m'}(\cos\theta)\sin\theta P_l^m(\cos\theta)\sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} \sin\varphi e^{i(m-m')\varphi} d\varphi \\ z_{ki} &= z_{l'm';lm} = C_{l'}^{m'} C_l^m \times \\ &\times r\int_0^\pi P_{l'}^{m'}(\cos\theta)\cos\theta P_l^m(\cos\theta)\sin\theta d\theta \int_0^{2\pi} e^{i(m-m')\varphi} d\varphi\,, \end{aligned} \tag{4.139}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

în care integralele după φ sunt diferite de zero numai dacă exponentul este nul, adică dacă este satisfăcută *regula de selecţie*

$$\Delta m = 0, \pm 1 . \tag{4.140}$$

Pentru integrala după θ din z_{ki} (când $\Delta m = 0$, deci $m = m'$), efectuăm schimbarea de variabilă $x = \cos\theta$, adică

$$\int_0^\pi P_{l'}^m(\cos\theta)\cos\theta P_l^m(\cos\theta)\sin\theta\, d\theta = \int_{-1}^1 P_{l'}^m(x)\, x\, P_l^m(x)\, dx . \tag{4.141}$$

Utilizăm următoarele relaţii de recurenţă pentru polinoamele Legendre (vezi Anexa **A.2** şi [25]) :

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad (l+1)P_{l+1} - (2l+1)\,x\,P_l + lP_{l-1} = 0 \\ &\text{b)}\quad P'_{l+1} - 2x\,P'_l + P'_{l-1} - P_l = 0 \\ &\text{c)}\quad xP'_l - P'_{l-1} - lP_l = 0 , \end{aligned} \tag{4.142}$$

pe care le prelucrăm în felul următor: înmulţim relaţia (4.142.c) cu 2 şi o adunăm la (4.142.b), rezultând:

$$P'_{l+1} - P'_{l-1} - (2l+1)P_l = 0 , \tag{4.143}$$

derivăm (4.142.a) de $|m|$ ori şi (4.143) de $|m-1|$ ori şi obţinem

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad (l+1)P_{l+1}^{(|m|)} - (2l+1)xP_l^{(|m|)} - (2l+1)\,|m|\,P_l^{(|m|-1)} + lP_{l-1}^{(|m|)} = 0 \\ &\text{b)}\quad P_{l+1}^{(|m|)} - P_{l-1}^{(|m|)} - (2l+1)P_l^{(|m-1|)} = 0 . \end{aligned} \tag{4.144}$$

Acum, înmulţim (4.144.b) cu $(-|m|)$ şi, adunând-o la (4.144.a), rezultă

$$(l-|m|+1)P_{l+1}^{(|m|)} - (2l+1)\,x\,P_l^{(|m|)} + (l+|m|)\,P_{l-1}^{(|m|)} = 0 . \tag{4.145}$$

Prin introducerea funcţiilor asociate Legendre (vezi Anexa **A.2**)

$$P_l^m = (1-x^2)^{|m|/2}\,P_l^{(|m|)} , \tag{4.146}$$

relaţia (4.145) devine

$$xP_l^m(x) = \frac{1}{2l+1}\left[(l-|m|+1)\,P_{l+1}^m + (l+|m|)P_{l-1}^m\right] , \tag{4.147}$$

punând în evidenţă faptul că integrala din (4.141) este diferită de zero doar dacă, pe lângă $m = m'$, mai este satisfăcută şi *regula de selecţie*

$$\Delta l = \pm 1 . \tag{4.148}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

4.6.4 Electronul în câmp magnetic variabil în timp

Considerând un electron, aflat într-un câmp magnetic de inducţie

$$\vec{B} = (B_1 \cos\omega t\,,\, B_1 \sin\omega t\,,\, B_0)\,, \tag{4.149}$$

ne propunem să determinăm probabilitatea de tranziţie la inversarea orientării spinului (*spin-flip probability*). Pentru a găsi o *soluţie exactă* a acestei probleme, aplicăm *metoda soluţiei formale*, de la perturbaţii dependente de timp, prezentată în paragraful 4.6.2.

Astfel, ecuaţia diferenţială de ordinul I corespunzătoare evoluţiei amplitudinii $\psi(t)$,

$$\frac{d\psi}{dt} = -iV\psi\,, \quad \text{cu } \hbar = 1\,, \tag{4.150}$$

poate fi scrisă sub forma (4.118) şi admite soluţia generală, formal exactă,

$$\psi(t) = \exp\left[-i\int_0^t V(t)\,dt\right]\psi(0)\,, \tag{4.151}$$

unde am pus în evidenţă *operatorul de evoluţie temporală*

$$U(t) = \exp\left[-i\int_0^t V(t)\,dt\right]. \tag{4.152}$$

În cazul nostru, operatorul perturbaţie, reprezentat de energia potenţială de interacţiune a momentului magnetic propriu cu câmpul magntic de inducţie (4.149)

$$V(t) = -\vec{\mu}_s \cdot \vec{B} = \frac{e}{m}\vec{S}\cdot\vec{B}\,, \tag{4.153}$$

are o expresie relativ complicată, dependentă explicit de timp, adică

$$\begin{aligned} V(t) &= \frac{e}{m}\left[(S_x\cos\omega t + S_y\sin\omega t)\,B_1 + S_zB_0\right] = \\ &= \frac{e}{m}\left[S_zB_0 + \frac{B_1}{2}\left(S_+\,e^{-i\omega t} + S_-\,e^{i\omega t}\right)\right] = \\ &= \omega_0\,S_z + \frac{\omega_1}{2}\left(S_+\,e^{-i\omega t} + S_-\,e^{i\omega t}\right), \end{aligned} \tag{4.154}$$

unde am introdus notaţiile:

$$\begin{aligned} \omega_0 &= \frac{eB_0}{m}\,, \\ \omega_1 &= \frac{eB_1}{m}\,. \end{aligned} \tag{4.155}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Este convenabil să efectuăm o transformare de etalon asupra funcţiei de undă,

$$\psi \to \psi' = e^A \psi , \tag{4.156}$$

cu

$$A = i\omega S_z t , \tag{4.157}$$

pentru care relaţia de transformare a derivatei este

$$\frac{d\psi}{dt} = e^{-A}\left[\frac{d\psi'}{dt} - i\omega S_z \psi'\right] . \tag{4.158}$$

Operatorul fluctuaţie (4.154) se transformă după regula generală (2.172), adică

$$V \to V' = e^A V e^{-A} = V + [A, V] + \dots , \tag{4.159}$$

şi capătă forma explicită

$$\begin{aligned} V' &= \omega_0 S_z + \frac{\omega_1}{2}\left(S_+ e^{-i\omega t} + S_- e^{i\omega t}\right) + \\ &+ i\omega t\left[S_z , \omega_0 S_z + \frac{\omega_1}{2} S_+ e^{-i\omega t} + \frac{\omega_1}{2} S_- e^{i\omega t}\right] + \dots \\ &\approx \omega_0 S_z + \omega_1 S_x , \end{aligned} \tag{4.160}$$

unde am utilizat relaţiile de comutatori (3.50) şi dezvoltările în serii Taylor $e^{\pm i\omega t} \approx 1 \pm i\omega t$. Utilizând relaţiile (4.158), (4.160) şi inversa lui (4.156), aducem ecuaţia de evoluţie (4.150) la forma

$$e^{-A}\left[\frac{d\psi'}{dt} - i\omega S_z \psi'\right] = -i\left(\omega_0 S_z + \omega_1 S_x\right) e^{-A}\psi' , \tag{4.161}$$

adică

$$\frac{d\psi'}{dt} = -i\left[(\omega_0 - \omega) S_z + \omega_1 S_x\right]\psi' , \tag{4.162}$$

a cărei soluţie exactă, (4.151), poate fi scrisă imediat ca fiind

$$\psi'(t) = \exp\left\{-i\left[(\omega_0 - \omega) S_z + \omega_1 S_x\right] t\right\}\psi'(0) , \tag{4.163}$$

permiţând evaluarea *probabilităţii de tranziţie* de la starea de spin iniţială, $|i\rangle$, la starea finală $|j\rangle$

$$\mathcal{P}_{ji}(t) = \left|\langle j| \exp\left\{-i\left[(\omega_0 - \omega) S_z + \omega_1 S_x\right] t\right\} |i\rangle\right|^2 . \tag{4.164}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Deoarece, la exponentul expresiei de mai sus, avem doi operatori, S_z şi S_x, care nu comută, ceea ce înseamnă că rezultatul nu va fi egal cu produsul exponenţialelor fiecărui operator, adică $\exp(F+G) \neq \exp(F)\cdot\exp(G)$, se impune să utilizăm formula generală

$$\exp(F+G) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(F+G)^{2n}}{(2n)!}\left[1+\frac{F+G}{2n+1}\right]. \tag{4.165}$$

În cazul exponenţialei din (4.164), operatorii F şi G au expresiile:

$$\begin{aligned} F &= -i(\omega_0-\omega)S_z\,t, \\ G &= -i\,\omega_1 S_x\,t \end{aligned} \tag{4.166}$$

şi, ţinând cont că $S_x^2 = S_y^2 = 1/4$ şi $\{S_x, S_z\} = 0$, avem:

$$(F+G)^2 = -\frac{1}{4}(\omega_0-\omega)^2\,t^2 - \frac{1}{4}\omega_1^2\,t^2\,. \tag{4.167}$$

În aceste condiţii, relaţia (4.165) devine

$$\begin{aligned} \exp(F+G) &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n\,t^{2n}}{2^{2n}\,(2n)!}\left[(\omega_0-\omega)^2+\omega_1^2\right]^n \\ &\times \left[1-\frac{i\,t}{2(2n+1)}\begin{pmatrix} \omega_0-\omega & \omega_1 \\ \omega_1 & \omega-\omega_0 \end{pmatrix}\right] \end{aligned} \tag{4.168}$$

iar elementele (4.164) ale matricei probabilităţii de tranziţie,

$$\mathcal{P}(t) = \begin{pmatrix} P_{1/2,1/2} & P_{1/2,-1/2} \\ P_{-1/2,1/2} & P_{-1/2,-1/2} \end{pmatrix}, \tag{4.169}$$

capătă forma explicită

$$\begin{aligned} \mathcal{P}_{ji}(t) &= \left|\left\langle j\left|\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n\,t^{2n}}{2^{2n}\,(2n)!}\left[(\omega_0-\omega)^2+\omega_1^2\right]^n\right.\right. \\ &\times \left.\left.\left[1-\frac{i\,t}{2(2n+1)}\begin{pmatrix} \omega_0-\omega & \omega_1 \\ \omega_1 & \omega-\omega_0 \end{pmatrix}\right]\right| i\right\rangle\Bigg|^2. \end{aligned} \tag{4.170}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Dacă, la momentul $t = 0$, starea inițială, $|i\rangle$, corespunde electronului cu spin *up*, atunci probabilitatea de tranziție spre starea finală, cu spinul *down*, va fi dată de elementul extra-diagonal al matricei (4.170), adică

$$P_{-1/2,1/2}(t) = \left| \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n t^{2n}}{2^{2n}(2n)!} \left[(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2 \right]^n \cdot \frac{-i\,t}{2(2n+1)} \cdot \omega_1 \right|^2 =$$

$$= \frac{\omega_1^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \cdot \frac{t^{2n+1}}{2^{2n+1}} \sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2}^{\,2n+1} \right]^2 =$$

$$= \frac{\omega_1^2}{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2} \sin^2 \frac{\sqrt{(\omega_0 - \omega)^2 + \omega_1^2}\, t}{2}. \qquad (4.171)$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Capitolul 5

Elemente de teoria ciocnirilor

5.1 Secţiunea de difuzie

Un fascicul de particule libere, monoenergetice, propagându-se paralel cu axa Oz, întâlneşte un obstacol, care acţionează într-un domeniu limitat şi care îl deviază. Fenomenul poartă numele de *ciocnire*. Aceasta poate fi:

- *elastică*, atunci când energia particulelor se conservă,
- *inelastică*, atunci când energia nu se conservă,
- *reacţie* între particule.

În cadrul prezentului capitol, ne vom ocupa exclusiv de primul tip de ciocnire, şi anume, de cea elastică. Presupunem că energia potenţială a particulelor, în domeniul $(\mathcal{D})$, are simetrie sferică, adică este de forma

$$V(\vec{r}) = V(r)\,, \tag{5.1}$$

astfel încât fenomenul studiat are o simetrie cilindrică. În figura 5.1 din **Anexa B**, este prezentată schema unui astfel de experiment.

Cunoscând fluxul (densitatea de curent) de particule – adică numărul de particule pe unitatea de timp şi pe unitatea de suprafaţă – din fasciculul incident, notat cu j_{in}, ne propunem să determinăm numărul de particule ce ies, în unitatea de timp, după împrăştiere, prin unghiul solid $d\Omega$, adică $dN = j_{em}\, dS$.

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

În mod evident, dN este proporţional atât cu j_{in}, cât şi cu $d\Omega$, adică $dN \sim j_{in}$ şi $dN \sim d\Omega$, deci putem scrie

$$dN = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) j_{in}\, d\Omega\,, \tag{5.2}$$

sau, raportându-ne la numărul de particule care ies din experiment, adică

$$dN = j_{em}\, dS = j_{em}\, r^2\, d\Omega\,,$$

putem scrie

$$j_{em}\, r^2 = \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) j_{in}\,. \tag{5.3}$$

Relaţia (5.3) defineşte *secţiunea diferenţială de difuzie* sau de *împrăştiere*, notată cu $\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) = r^2\, |j_{em}/j_{in}|$.

Procesul studiat este descris de funcţia de stare

$$\Psi(\vec{r}, t) = \psi(\vec{r})\, e^{-\frac{i}{\hbar} Et}\,, \tag{5.4}$$

soluţie a ecuaţiei Schrödinger (1.27), adică

$$\Delta\psi + k^2 \psi = U(r)\, \psi\,, \tag{5.5}$$

unde am introdus notaţiile:

$$\begin{aligned} &\text{(a)} \quad k^2 = \frac{2\mu E}{\hbar^2}\,; \\ &\text{(b)} \quad U(r) = \frac{2\mu}{\hbar^2} V(r)\,. \end{aligned} \tag{5.6}$$

La distanţă suficient de mare de centrul de difuzie, funcţia de undă poate fi scrisă ca superpoziţia undei plane, ce descrie particulele incidente, şi a undei sferice, ce descrie particulele împrăştiate de către câmpul în care energia lor este $V(r)$. Astfel, înlocuind în funcţia de undă

$$\psi(\vec{r}) = \psi_{in} + \psi_{em}\,, \tag{5.7}$$

expresiile

$$\begin{aligned} \psi_{in} &\equiv \psi_1 = e^{ikz} \\ \psi_{em} &\equiv \psi_2 = f(\theta)\, \frac{e^{ikr}}{r}\,, \end{aligned} \tag{5.8}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

putem calcula fluxurile, definite prin relaţia (1.60), ca fiind

$$|\vec{j}_{in}| = j_{1z} = \frac{i\hbar}{2\mu}[e^{ikz}(-ik)e^{-ikz} - e^{-ikz}(ik)e^{ikz}],$$

adică

$$|\vec{j}_{in}| = \frac{\hbar k}{\mu}, \tag{5.9}$$

şi

$$|\vec{j}_{em}| = j_{2r} = \frac{i\hbar}{2\mu}|f(\theta)|^2\left\{\frac{e^{ikr}}{r}\left(\frac{-ik}{r} - \frac{1}{r^2}\right)e^{-ikr} - \frac{e^{-ikr}}{r}\left(\frac{ik}{r} - \frac{1}{r^2}\right)e^{ikr}\right\},$$

adică

$$|\vec{j}_{em}| = \frac{\hbar k}{\mu}|f(\theta)|^2\frac{1}{r^2}. \tag{5.10}$$

Introducând relaţiile (5.9, 10) în (5.3), rezultă următoarea expresie a secţiunii de împrăştiere

$$\left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) = |f(\theta)|^2. \tag{5.11}$$

Deci studiul cuantic al împrăştierii înseamnă căutarea soluţiei ecuaţiei (5.5), care să aibă soluţia asimptotică (5.7, 8). Pentru un potenţial dat, obţinem funcţia $f(\theta)$ care ne permite calculul atât al secţiunii diferenţiale, cât şi al *secţiunii totale de difuzie* sau de *împrăştiere*, definită ca integrala secţiunii diferenţiale peste întregul unghi solid, adică

$$\sigma = \int_0^{\pi} |f(\theta)|^2\, d\Omega, \quad d\Omega = 2\pi \sin\theta\, d\theta. \tag{5.12}$$

5.2 Ecuaţia diferenţială a împrăştierii

Înlocuim (5.7) în (5.5), adică

$$\Delta\psi_{in} + \Delta\psi_{em} + k^2\psi_{in} + k^2\psi_{em} = U(r)\psi_{in} + U(r)\psi_{em},$$

şi, ţinând cont că

$$\Delta\psi_{in} + k^2\psi_{in} = \frac{d^2}{dz^2}e^{ikz} + k^2e^{ikz} = 0,$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

obţinem ecuaţia

$$\Delta\psi_{em} + k^2\,\psi_{em} = U(r)\,e^{ikz} + U(r)\psi_{em}\,. \tag{5.13}$$

Precum rezultă din (5.8), $|\psi_{in}| = 1$ şi $|\psi_{em}| = |f(\theta)|/r$ şi deci, la distanţe suficient de mari, avem $|\psi_{em}| \ll |\psi_{in}| = 1$. În consecinţă, putem neglija ultimul termen din (5.13) şi obţinem, astfel, ecuaţia care descrie procesul ciocnirii pentru unda emergentă, sub forma

$$\Delta\psi_{em} + k^2\,\psi_{em} = U(r)\,e^{ikz}\,. \tag{5.14}$$

Vom studia două cazuri particulare [34, 45]:

a. energia particulelor incidente este mare faţă de energia de interacţiune care deviază aceste particule (aproximaţia Born, [5]) şi

b. cazul opus, adică cel corespunzător energiei mici a particulelor incidente (metoda undelor parţiale).

5.3 Aproximaţia Born

În acest paragraf, vom analiza problema împrăştierii particulelor de masă m şi energie E în câmpul potenţial $V(\vec{r})$, prin găsirea formei asimptotice a soluţiei $\psi_{em}(\vec{r})$, corespunzătoare undei împrăştiate, divergente. Pentru aceasta, vom scrie ecuaţia (5.5) sub forma

$$H_k(\vec{r})\psi(\vec{r}) = U(\vec{r})\,\psi(\vec{r}) \tag{5.15}$$

cu ajutorul operatorului Helmholtz

$$H_k(\vec{r}) = \Delta + k^2\,. \tag{5.16}$$

Pentru a exprima soluţia ecuaţiei (5.15) cu ajutorul inversului acestui operator, $H_k^{-1}(\vec{r})$, vom utiliza definiţia *funcţiei Green*,

$$H_k(\vec{r})\,G(\vec{r},\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,')\,, \tag{5.17}$$

şi reprezentarea integrală a funcţiei $\delta-$Dirac în spectru continuu, (2.248), adică

$$\delta(\vec{r}-\vec{r}\,') = \int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3}\,e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}\,. \tag{5.18}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

B.C.U. „M. EMINESCU" IAȘI FIZICA

Din acţiunea lui H_k asupra exponenţialei,

$$H_k\, e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')} = (\Delta + k^2)\, e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')} = -(p^2 - k^2)\, e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}, \tag{5.19}$$

rezultă

$$H_k^{-1}\, e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')} = -\frac{1}{p^2 - k^2}\, e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}, \tag{5.20}$$

cu $p^2 = |\vec{p}|^2$. Cu ajutorul funcţiei (5.18), ecuaţia (5.15) poate fi scrisă sub forma

$$H_k(\vec{r})\,\psi(\vec{r}) = \int \delta(\vec{r} - \vec{r}\,')\, U(\vec{r}\,')\,\psi(\vec{r}\,')\, d\vec{r}\,' \tag{5.21}$$

şi devine o ecuaţie integrală prin acţiunea, la stânga, cu operatorul H_k^{-1},

$$\psi(\vec{r}) = \psi_{in}(\vec{r}) + \int G(\vec{r}, \vec{r}\,')\, U(\vec{r}\,')\,\psi(\vec{r}\,')\, d\vec{r}\,' \tag{5.22}$$

unde, din (5.17) şi (5.20), funcţia Green are reprezentarea Fourier

$$G(\vec{r}, \vec{r}\,') = H_k^{-1}(\vec{r})\,\delta(\vec{r} - \vec{r}\,') = -\int \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3}\, \frac{e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}}{p^2 - k^2}, \tag{5.23}$$

iar

$$\psi_{in}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \tag{5.24}$$

este soluţia ecuaţiei omogene

$$H_k(\vec{r})\,\psi_{in}(\vec{r}) = 0\,. \tag{5.25}$$

În primul ordin de aproximaţie, adică la nivelul primei iteraţii, funcţia $\psi(\vec{r}\,')$ din convoluţia cu funcţia Green [31] se înlocuieşte cu funcţia de undă plană corespunzătoare particulelor incidente, ψ_{in}, astfel încât, forma explicită a soluţiei de ordinul I are reprezentarea integrală

$$\psi_{(1)}(\vec{r}) = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} - \int d\vec{r}\,' \frac{d\vec{p}}{(2\pi)^3}\, \frac{e^{i\vec{p}\cdot(\vec{r}-\vec{r}\,')}}{p^2 - k^2}\, U(\vec{r}\,')\, e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'}\,. \tag{5.26}$$

La distanţe mari de centrul de împrăştiere, *unda emergentă* se defineşte prin:

$$\psi_{em}(\vec{r}) \triangleq f(\theta,\varphi)\,\frac{e^{ikr}}{r} \triangleq \psi_{(1)}(\vec{r}) - e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \tag{5.27}$$

BCU IAȘI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

astfel încât, din (5.26), exprimând pe $\vec{p}$ în coordonate sferice, obţinem

$$\begin{aligned}
\psi_{em}(\vec{r}) &= -\int d\vec{r}\,' \frac{p^2\,dp\,\sin\alpha d\alpha\,d\beta}{(2\pi)^3} \frac{e^{ip|\vec{r}-\vec{r}\,'|\cos\alpha}}{p^2-k^2} U(\vec{r}\,')\,e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'} = \\
&= -\int d\vec{r}\,' \frac{p^2\,dp\,\sin\alpha\,d\alpha}{(2\pi)^2} \frac{e^{ip|\vec{r}-\vec{r}\,'|\cos\alpha}}{p^2-k^2} U(\vec{r}\,')\,e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'} = \\
&= \int_{\mathrm{R}^3} d\vec{r}\,' \frac{U(\vec{r}\,')\,e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'}}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} \int_0^\infty \frac{p\,dp}{(2\pi)^2} \frac{-i}{(p^2-k^2)} \\
&\times \int_0^\pi e^{ip|\vec{r}-\vec{r}\,'|\cos\alpha}\,d\left(ip\,|\vec{r}-\vec{r}\,'|\cos\alpha\right) = \\
&= -i\int_{\mathrm{R}^3} \frac{d\vec{r}\,'}{|\vec{r}-\vec{r}\,'|} U(\vec{r}\,')\,e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'} \int_0^\infty \frac{dp\,p}{4\pi^2(p^2-k^2)} \left[e^{-ip|\vec{r}-\vec{r}\,'|} - e^{ip|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\right]
\end{aligned}$$

În prima exponenţială, îl trecem pe p în $-p$ şi mai avem în vedere că, pentru valori foarte mari ale lui $|\vec{r}|$, $|\vec{r}-\vec{r}\,'|$ este practic constant, adică $|\vec{r}-\vec{r}\,'| \approx r$, faţă de variaţia foarte rapidă a exponenţialei armonice $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'}$, în timpul integrării după $\vec{r}\,'$. În consecinţă, expresia de mai sus devine

$$\psi_{em}(\vec{r}) \approx \frac{i}{4\pi^2}\frac{1}{r}\int_{\mathrm{R}^3} d\vec{r}\,'\,U(\vec{r}\,')\,e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'} \int_{\mathrm{R}} \frac{dp}{p^2-k^2}\,p\,e^{ip|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\,. \tag{5.28}$$

Evaluăm integrala după p, prin Teorema Reziduurilor, pentru polul $p = k$, deoarece acesta corespunde undelor *out* (cele care, după împrăştiere, se îndepărtează de centrul zonei de difuzie, spre ∞, în toate direcţiile)

$$\int_{\mathrm{R}} \frac{dp}{p^2-k^2}\,p\,e^{ip|\vec{r}-\vec{r}\,'|} = 2\pi i\,\frac{1}{2k}\,k\,e^{ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|} = \pi i\,e^{ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\,. \tag{5.29}$$

Cu (5.29), soluţia (5.28) capătă forma explicită

$$\psi_{em}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi r}\int_{\mathrm{R}^3} d\vec{r}\,'\,U(\vec{r}\,')\,e^{ik|\vec{r}-\vec{r}\,'|}\,e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}\,'} \tag{5.30}$$

care, având în vedere că, pentru $|\vec{r}\,'| \ll |\vec{r}|$, avem

$$|\vec{r}-\vec{r}\,'| = \left[r^2 + r'^2 - 2\vec{r}\cdot\vec{r}\,'\right]^{1/2} \approx r - \frac{\vec{r}}{r}\cdot\vec{r}\,', \tag{5.31}$$

devine

$$\psi_{em}(\vec{r}) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ikr}}{r}\int_{\mathrm{R}^3} d\vec{r}\,'\,U(\vec{r}\,')\,e^{i(\vec{k}-k\vec{u}_r)\cdot\vec{r}\,'}\,. \tag{5.32}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Din (5.27), rezultă expresia integrală a amplitudinii de împrăştiere

$$f(\theta,\varphi) = -\frac{1}{4\pi}\int_{R^3} d\vec{r}\,' U(\vec{r}\,') e^{i(\vec{k}-k\vec{u}_r)\cdot\vec{r}\,'} = -\frac{1}{4\pi}\int_{R^3} d\vec{r}\,' U(\vec{r}\,') e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}\,'}, \quad (5.33)$$

unde am introdus *impulsul de transfer*

$$\vec{q} = \vec{k} - k\vec{u}_r, \quad (5.34)$$

cu

$$|\vec{q}|^2 = 2k^2(1-\cos\theta) = 4k^2\sin^2\frac{\theta}{2},$$

adică

$$|\vec{q}| = 2k\sin\frac{\theta}{2}, \quad (5.35)$$

unde $\theta = \left(\vec{k},\hat{\vec{u}}_r\right)$ este *unghiul de împrăştiere.*

Pentru un *potenţial cu simetrie sferică*, $U(r')$, amplitudinea (5.33) este independentă de unghiul azimutal φ şi, trecând la coodonate sferice, (r, α, β), adică

$$\vec{q}\cdot\vec{r}\,' = q r'\cos\alpha, \quad d\vec{r}\,' = r'^2\sin\alpha\, dr'\, d\alpha\, d\beta, \quad (5.36)$$

efectuăm, în (5.33), integrala după β şi α,

$$\int_0^{2\pi} d\beta \int_0^{\pi} e^{iqr'\cos\alpha}\sin\alpha\, d\alpha = 2\pi\int_{-1}^{1} e^{iqr'x}\, dx = 4\pi\frac{\sin(qr')}{qr'}. \quad (5.37)$$

Astfel, amplitudinea de împrăştiere (5.33) capătă forma finală

$$f(\theta) = -\frac{1}{q}\int_0^{\infty} U(r')\sin(qr')\, r'\, dr' = -\frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{q}\int_0^{\infty} V(r')\sin(qr')\, r'\, dr', \quad (5.38)$$

unde am utilizat (5.6.b). Observăm că $f(\theta)$ depinde numai de θ, prin intermediul lui q dat de (5.35), şi ne permite să determinăm expresia concretă a secţiunii diferenţiale de împrăştiere, (5.11), şi a secţiunii totale, (5.12), pentru un potenţial $V(r')$ cunoscut.

Dacă *potenţialul* este o *funcţie pară* de r' atunci, utilizând relaţia

$$\sin(qr') = \frac{e^{iqr'} - e^{-iqr'}}{2i},$$

aducem expresia (5.38) la forma

$$f(\theta) = \frac{i}{2q}\int_{-\infty}^{\infty} U(r')\, e^{iqr'}\, r'\, dr' = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{i}{2q}\int_{-\infty}^{\infty} V(r')\, e^{iqr'}\, r'\, dr'. \quad (5.39)$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

5.4 Împrăştierea particulelor în potenţialele Yukawa şi coulombian

Vom utiliza relaţiile deduse în paragraful precedent pentru a calcula secţiunea diferenţială şi totală de împrăştiere a particulelor de masă m şi energie E, în aproximaţia Born, pentru potenţialul[1] exponenţial cu simetrie sferică [9]

$$V(r) = \frac{A}{r} \exp\left(-\frac{r}{r_0}\right). \tag{5.40}$$

În acest caz, rezultatul integralei din (5.38), în care

$$\sin(qr) = \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{2i},$$

este:

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty V(r) \sin(qr)\, r\, dr = \\ &= \frac{A}{2i} \int_0^\infty \left[\exp\left(-\frac{r}{r_0} + iqr\right) - \exp\left(-\frac{r}{r_0} - iqr\right)\right] dr = \\ &= \frac{Aq}{q^2 + \frac{1}{r_0^2}}, \end{aligned} \tag{5.41}$$

conducând la următoarea expresie a amplitudinei de împrăştiere

$$f(\theta) = -\frac{2mA}{\hbar^2 \left[4k^2 \sin^2\frac{\theta}{2} + \frac{1}{r_0^2}\right]} \tag{5.42}$$

şi la secţiunea diferenţială

$$d\sigma = |f(\theta)|^2\, d\Omega = \left(\frac{2mA}{4p^2 \sin^2\frac{\theta}{2} + \frac{\hbar^2}{r_0^2}}\right)^2 d\Omega, \tag{5.43}$$

cu $p = \hbar k$. În cazul când constanta A este $A = Z_1 Z_2 e^2$, pentru $r_0 \to \infty$, expresia (5.40) se reduce la energia în potenţialul coulombian,

$$V(r) = \frac{Z_1\, Z_2\, e^2}{r},$$

[1] Aceasta este energia potenţială de interacţiune. În multe cazuri, prin abuz de limbaj, ea este denumită tot *potenţial*.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

iar expresia (5.43) devine chiar *formula lui Rutherford*

$$d\sigma = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{4E \sin^2 \frac{\theta}{2}}\right)^2 d\Omega, \tag{5.44}$$

unde $E = p^2/(2m)$ este energia cinetică a particulelor împrăştiate. Se poate arăta că această relaţie, deşi a fost obţinută în cadrul aproximaţiei Born, este mai generală, fiind valabilă şi în afara domeniului de aplicabilitate al aproximaţiei folosite [9]. Observăm că, pentru un unghi θ fixat, secţiunea diferenţială scade pătratic cu creşterea energiei particulelor împrăştiate. De asemenea, la unghiuri mici, $\theta \to 0$, expresia lui $d\sigma$ diverge.

În încheiere, revenind la potenţialul (5.40), calculăm secţiunea totală de împrăştiere, cu definiţia (5.12), şi obţinem:

$$\begin{aligned}
\sigma &= \int_0^\pi \left[\frac{2mA}{4p^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} + \frac{\hbar^2}{r_0^2}}\right]^2 2\pi \sin\theta \, d\theta = \\
&= 32\,\pi\, m^2 A^2 \int_0^\pi \frac{\sin\frac{\theta}{2} \cos\frac{\theta}{2} \frac{d\theta}{2}}{\left(4p^2 \sin^2 \frac{\theta}{2} + \frac{\hbar^2}{r_0^2}\right)^2} = 32\pi m^2 A^2 \int_0^1 \frac{x\, dx}{\left(4p^2 x^2 + \frac{\hbar^2}{r_0^2}\right)^2} = \\
&= \frac{16\pi m^2 A^2 r_0^4}{\hbar^4 (1 + 4r_0^2 k^2)}.
\end{aligned} \tag{5.45}$$

5.5 Metoda undelor parţiale

Considerăm o împrăştiere pe un potenţial de tip central, $V(r)$, şi căutăm o funcţie cu forma generală

$$\Psi(\vec{r}, t) = \int_0^\infty dk \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^{l} C_{klm} F_{kl}(r) Y_l^m(\theta, \varphi)\, e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t} \tag{5.46}$$

a cărei amplitudine, pentru un $|k|$ fixat (undă monocromatică), este

$$\psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{l,m} C_l^m \frac{R_l(r)}{r} Y_l^m(\theta, \varphi), \tag{5.47}$$

BCU IAŞI CENTRALA UNIVERSITARĂ LIBRARY

satisfăcând ecuaţia (5.5) cu notaţiile (5.6). Ţinând cont de relaţiile

$$\Delta\left[\frac{R_l(r)}{r}\right] = \frac{1}{r}R_l''$$
$$\tilde{\Delta}Y_l^m = -l(l+1)\,Y_l^m\,,$$

în (5.5), obţinem pentru componenta radială a funcţiei de amplitudine următoarea ecuaţie diferenţială

$$R_l'' + \left[k^2 - U(r) - \frac{l(l+1)}{r^2}\right]R_l = 0\,. \tag{5.48}$$

Problema având o simetrie cilindrică, funcţia de amplitudine nu depinde de unghiul azimutal φ şi deci, considerând $m = 0$, funcţia (5.47) devine

$$\psi(r,\theta) = \sum_l C_l \frac{R_l(r)}{r} Y_l^0(\theta)\,, \tag{5.49}$$

cu

$$Y_l^0(\theta) = \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\,P_l(\cos\theta)\,,$$

unde am utilizat relaţia (56) din Anexa **A.3**, pentru $m = 0$. Pentru a-l determina pe C_l, vom impunem condiţia ca forma asimptotică a lui ψ să coincidă cu (5.7), adică, pentru $z = r\cos\theta$, să aibă expresia

$$\overset{(a)}{\psi}(r,\theta) = e^{ikr\cos\theta} + f(\theta)\frac{e^{ikr}}{r}\,. \tag{5.50}$$

Din (5.48), obţinem ecuaţia radială asimptotică

$$\overset{(a)}{R_l}{}'' + k^2\overset{(a)}{R_l} = 0\,, \tag{5.51}$$

cu soluţia

$$\overset{(a)}{R_l} = A_l\sin(kr + B_l)\,, \tag{5.52}$$

în care, din motive practice, vom considera următoarele expresii pentru constante:

$$A_l = \frac{1}{k}\;;\;\; B_l = \delta_l - l\frac{\pi}{2}\,. \tag{5.53}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Astfel, partea radială a soluţiei asimptotice are forma

$$\overset{(a)}{R}_l = \frac{1}{k}\,\sin\left(kr + \delta_l - l\,\frac{\pi}{2}\right), \tag{5.54}$$

care, prin înlocuire în (5.49), ne conduce la soluţia asimptotică

$$\overset{(a)}{\psi}(r,\theta) = \sum_l C_l\,\frac{\sin(kr+\delta_l - l\pi/2)}{kr}\,Y_l^0(\theta), \tag{5.55}$$

adică

$$\overset{(a)}{\psi}(r,\theta) = \sum_l \frac{C_l}{2ik}\left[\frac{e^{ikr}}{r}\,e^{i(\delta_l - l\pi/2)} - \frac{e^{-ikr}}{r}\,e^{-i(\delta_l - l\pi/2)}\right] Y_l^0(\theta). \tag{5.56}$$

Pe de altă parte, din teoria funcţiilor speciale, se cunoaşte următoarea formulă [34]

$$e^{ikr\cos\theta} = \sqrt{4\pi}\sum_l \sqrt{2l+1}\,e^{il\pi/2}\sqrt{\frac{\pi}{2kr}}\,\mathcal{J}_{l+1/2}(kr)\,Y_l^0(\theta), \tag{5.57}$$

unde $\mathcal{J}_{l+1/2}$ sunt *funcţiile Bessel–$\mathcal{J}$* de ordin semiîntreg, a căror expresie, în aproximaţia $r \to \infty$, este

$$\mathcal{J}_{l+1/2}(kr) \approx \sqrt{\frac{2}{\pi kr}}\,\sin(kr - l\pi/2). \tag{5.58}$$

Utilizând rezultatele (5.56) şi (5.57) cu (5.58), din (5.50) obţinem:

$$f(\theta)\,\frac{e^{ikr}}{r} = \overset{(a)}{\psi}(r,\theta) - e^{ikr\cos\theta} =$$

$$= \sum_l \left\{ \frac{C_l}{2ik}\left[\frac{e^{ikr}}{r}\,e^{i(\delta_l - l\pi/2)} - \frac{e^{-ikr}}{r}\,e^{-i(\delta_l - l\pi/2)}\right] - \right.$$

$$\left. - \sqrt{4\pi(2l+1)}\,e^{il\pi/2}\sqrt{\frac{\pi}{2kr}}\sqrt{\frac{2}{\pi kr}}\,\frac{1}{2i}\left[e^{ikr}\,e^{-il\pi/2} - e^{-ikr}\,e^{il\pi/2}\right]\right\} Y_l^0(\theta),$$

adică

$$f(\theta)\,\frac{e^{ikr}}{r} = \sum_l \left\{ \frac{e^{ikr}}{2ikr}\left[C_l\,e^{i(\delta_l - l\pi/2)} - \sqrt{4\pi(2l+1)}\right] - \right.$$

$$\left. - \frac{e^{-ikr}}{2ikr}\left[C_l\,e^{-i(\delta_l - l\pi/2)} - \sqrt{4\pi(2l+1)}\,(-1)^l\right]\right\} Y_l^0(\theta). \tag{5.59}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

În relaţia de mai sus, exponenţialele fiind liniar independente, rezultă, prin identificare, expresia constantei C_l,

$$C_l = \sqrt{4\pi(2l+1)}\,(-1)^l\, e^{-il\pi/2}\, e^{i\delta_l} = \sqrt{4\pi(2l+1)}\, i^l\, e^{i\delta_l}\,, \tag{5.60}$$

care, înlocuită în (5.59), ne conduce la

$$\begin{aligned} f(\theta) &= \sum_l \frac{1}{2ik}\sqrt{4\pi(2l+1)}\left[i^l\, e^{2i\delta_l}\,\underbrace{e^{-il\pi/2}}_{i^{-l}} - 1\right] Y_l^0(\theta) = \\ &= \frac{\sqrt{\pi}}{ik}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{(2l+1)}\left(e^{2i\delta_l} - 1\right) Y_l^0(\theta) = \\ &= \frac{2\sqrt{\pi}}{k}\sum_{l=0}^{\infty}\sqrt{(2l+1)}\, e^{i\delta_l}\,\sin\delta_l \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, P_l(\cos\theta)\,, \end{aligned}$$

adică la relaţia obţinută de Faxen şi Holtsmark [34], în 1927,

$$f(\theta) = \frac{1}{k}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\, e^{i\delta_l}\,\sin\delta_l\, P_l(\cos\theta)\,. \tag{5.61}$$

Cu acest rezultat, secţiunea eficace (5.11) are expresia concretă

$$\begin{aligned} \left(\frac{d\sigma}{d\Omega}\right) &= f(\theta) f^*(\theta) = \\ &= \frac{4\pi}{k^2}\sum_{l,l'}\sqrt{(2l+1)(2l'+1)}\, e^{i\delta_l}\, e^{-i\delta_{l'}}\,\sin\delta_l\,\sin\delta_{l'}\, Y_l^0 Y_{l'}^0 = \\ &= \frac{1}{k^2}\sum_{l,l'}(2l+1)(2l'+1)\, e^{i\delta_l}\, e^{-i\delta_{l'}}\,\sin\delta_l\,\sin\delta_{l'}\, P_l(\cos\theta) P_{l'}(\cos\theta) \end{aligned} \tag{5.62}$$

iar secţiunea eficace totală, (5.12), rezultă ca fiind

$$\sigma = \frac{4\pi}{k^2}\sum_l (2l+1)\,\sin^2\delta_l\,, \tag{5.63}$$

unde am ţinut cont de relaţia de ortonormare a funcţiilor sferice (A.44), cu (A.45), adică

$$\int_0^\pi P_l(\cos\theta)\, P_{l'}(\cos\theta)\,\sin\theta\, d\theta = \frac{2}{(2l+1)}\,\delta_{ll'}\,. \tag{5.64}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Se pare că am găsit o soluţie *exactă* a ecuaţiei *aproximative* (5.14). Din punct de vedere practic, avem un avantaj şi un dezavantaj. Avantajul constă în faptul că, în general, este suficientă cunoaşterea primilor câţiva termeni (unul sau doi), din seria (5.62), respectiv (5.63), deoarece, viteza fiind mică (deci şi impulsul), avem, până la o distanţă apreciabilă faţă de centrul de difuzie, caracterul unei ciocniri centrale $l = 0$, sau cel mult $l = 1$, momentul cinetic total $\hbar\sqrt{l(l+1)}$ fiind – în acord cu principiul corespondenţei – mvb, unde b este parametrul de ciocnire.

Dezavantajul constă în dificultatea determinării defazajelor δ_l, care rezultă din condiţiile de continuitate pentru R_l şi R_l', de unde necesitatea cunoaşterii soluţiei ecuaţiei radiale (5.14) şi racordarea ei la soluţia asimptotică (5.54). Totuşi, în acord cu [34], se poate deduce o expresie de principiu pentru dependenţa acestui defazaj de potenţialul împrăştietor. Estimând expresia asimptotică a fazei undei împrăştiate,

$$\phi_S = \int_{r_0}^{r} \sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2} - U(r)}\, dr + \frac{\pi}{4}, \tag{5.65}$$

şi faza în absenţa împrăştierii,

$$\phi_F = \int_{r_0}^{r} \sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}}\, dr + \frac{\pi}{2}, \tag{5.66}$$

se defineşte defazajul δ_l ca fiind diferenţa lor, adică

$$\begin{aligned}\delta_l &= \int_{r_0}^{\infty} \left\{ \sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2} - U(r)} - \sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}} \right\} dr = \\ &= -\int_{r_0}^{\infty} \frac{U(r)\, dr}{\sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2} - U(r)} + \sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}}}. \end{aligned} \tag{5.67}$$

Neglijând pe $U(r)$ la numitor şi utilizând (5.6.b), rezultă expresia aproximativă a *defazajului principial* ca fiind

$$\delta_l \approx -\frac{m}{\hbar^2} \int_{r_0}^{\infty} \frac{V(r)\, dr}{\sqrt{k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r^2}}}, \tag{5.68}$$

unde r_0 este rădăcina ecuaţiei

$$k^2 - \frac{(l+1/2)^2}{r_0^2} - \frac{2m}{\hbar^2} V(r_0) = 0, \tag{5.69}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

cu $r_0 \in \mathbf{R}_+$.

În încheiere, ţinând cont de cele discutate în acest paragraf, putem scrie o formă finală a funcţiei (5.46). Observăm că funcţia radială

$$F_{kl} = \sqrt{\frac{k}{r}}\, J_{l+1/2}(kr) \tag{5.70}$$

satisface condiţia de normare

$$\int_0^\infty r^2\, F_{k'l}\, F_{kl}\, dr = \delta(k'-k)\,. \tag{5.71}$$

Într-adevăr, pentru $J_{l+1/2}(kr)$ de forma (5.58), avem:

$$\begin{aligned}
&\int_0^\infty r^2\, F_{k'l}\, F_{kl}\, dr = \\
&= \frac{2}{\pi}\int_0^\infty \sin\left(k'r - l\frac{\pi}{2}\right)\sin\left(kr - l\frac{\pi}{2}\right) dr = \\
&= \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \left\{\cos(k'-k)r - \cos\left[(k'+k)r - l\pi\right]\right\} dr = \\
&= \frac{1}{2\pi}\int_{\mathbf{R}} e^{i(k'-k)r}\, dr - \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty (-1)^l\, e^{i(k'+k)r}\, dr - \\
&- \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty (-1)^l\, e^{-i(k'+k)r}\, dr = \\
&= \delta(k'-k) - (-1)^l\delta(k'+k)\,,
\end{aligned}$$

unde am utilizat analogul, în spaţiul impulsurilor, al relaţiei (2.230) de dezvoltare în integrală Fourier a funcţiei δ. Ultimul termen al expresiei de mai sus fiind zero, deoarece k', $k \in \mathbf{R}_+$, se verifică relaţia (5.71). Pentru o împrăştiere axial simetrică, independentă de φ, astfel încât $m = 0$, putem scrie forma finală a funcţiei (5.46) ca fiind

$$\Psi(r,\theta,t) = \int_0^\infty dk \sum_{l=0}^\infty C_{kl0}\, \sqrt{\frac{k}{r}}\, J_{l+1/2}(kr)\, \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi}}\, P_l(\cos\theta)\, e^{-i\frac{\hbar k^2}{2m}t}\,. \tag{5.72}$$

BCUJAS CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Capitolul 6

Sisteme de particule

Considerăm un sistem format din N particule, descris de o funcţie de stare dependentă de coordonate şi de timp, adică de $3N+1$ variabile,

$$\Psi = \Psi(\vec{r}_1, \ldots, \vec{r}_N; t) \equiv \Psi(1, \ldots N; t)\,, \tag{6.1}$$

şi elementul de volum

$$d\tau = d\vec{r}_1 \ldots d\vec{r}_N = d\tau_k\, d\vec{r}_k = d\tau_{ik}\, d\vec{r}_i\, d\vec{r}_k\,, \tag{6.2}$$

în spaţiul de configuraţie $3N$-dimensional, denumit, pe scurt, *spaţiul* $3N$. Atunci, mărimile

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad \rho = |\Psi|^2 \\ &\text{b)} \quad \rho_k = \int \rho\, d\tau_k \\ &\text{c)} \quad \rho_{ik} = \int \rho\, d\tau_{ik} \end{aligned} \tag{6.3}$$

au semnificaţii de densităţi de probabilitate, dacă este satisfăcută condiţia de normare (1.63), iar funcţia Ψ satisface ecuaţia Schrödinger temporală, (2.10), cu hamiltonianul

$$\hat{H} = \sum_k \left(\frac{\hat{p}_k^2}{2m_k} + V_k \right) + \frac{1}{2}{\sum_{i,k}}' V_{ik}\,, \tag{6.4}$$

unde $V_k = V_k(\vec{r}_k)$ este energia particulei k, în câmp exterior, iar $V_{ik} = V_{ik}(\vec{r}_i, \vec{r}_k)$ este energia de interacţiune între particulele i şi k.

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

6.1 Ecuaţia de continuitate

Scriem ecuaţia Schrödinger şi conjugata sa hermitică, adică

$$\sum\left(-\frac{\hbar^2}{2m_k}\Delta_k + V_k\right)\Psi + \sum{}'V_{ik}\,\Psi = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi}{\partial t}$$
$$\sum\left(-\frac{\hbar^2}{2m_k}\Delta_k + V_k\right)\Psi^* + \sum{}'V_{ik}\,\Psi^* = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\,, \qquad (6.5)$$

şi, adunând prima relaţie, multiplicată cu $-\Psi^*$, cu a doua, multiplicată cu Ψ, rezultă

$$-\sum\frac{\hbar^2}{2m_k}\left(\Psi\Delta_k\Psi^* - \Psi^*\Delta_k\Psi\right) = \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}(\Psi\Psi^*)\,,$$

adică obţinem *ecuaţia de continuitate în spaţiul* $3N$:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \sum\nabla_k\cdot\vec{I}_k = 0\,. \qquad (6.6)$$

Mărimea scalară $\rho = |\Psi|^2$ reprezintă densitatea de probabilitate ca la momentul t, în colectivul celor N particule, prima să ocupe poziţia $\vec{r}_1$, a doua $\vec{r}_2$ ş.a.m.d. a N-a, poziţia $\vec{r}_N$. Câmpul 3-vectorial (dependent de $3N+1$ variabile),

$$\vec{I}_k = \frac{i\hbar}{2m_k}\left(\Psi\nabla_k\Psi^* - \Psi^*\nabla_k\Psi\right), \qquad (6.7)$$

exprimă generalizarea, în spaţiul $3N$, a densităţii curentului de probabilitate asociat particulei k. Integrăm ecuaţia (6.6) după $3(N-1)$ variabile (vezi (6.2)) şi rezultă

$$\int\left(\frac{\partial\rho}{\partial t} + \sum_k\nabla_k\cdot\vec{I}_k\right)d\tau_i = 0\,,$$

respectiv

$$\frac{\partial}{\partial t}\int\rho\,d\tau_i + \int\nabla_i\cdot\vec{I}_i\,d\tau_i + \sum_{k\neq i}\int\nabla_k\cdot\vec{I}_k\,d\tau_i = 0\,, \qquad (6.8)$$

unde $d\tau_i = d\vec{r}_1 d\vec{r}_2\ldots d\vec{r}_{i-1}d\vec{r}_{i+1}\ldots d\vec{r}_N$. Ultimii doi termeni din membrul stâng ai relaţiei (6.8) au respectiv expresiile:

$$\int\nabla_i\cdot\vec{I}_i\,d\tau_i = \nabla_i\cdot\int\vec{I}_i\,d\tau_i \equiv \nabla_i\cdot\vec{j}_i \qquad (6.9)$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi

$$\int \nabla_k \cdot \vec{I}_k \, d\tau_i = \int \left\{ \int_{E_3} \nabla_k \cdot \vec{I}_k \, d\vec{r}_k \right\} d\tau_{ik} = \int \left\{ \int_{\partial E_3} \vec{I}_k \cdot d\vec{\sigma}_k \right\} d\tau_{ik} = 0 . \quad (6.10)$$

Cu rezultatele (6.3.b, 9, 10), ecuaţia (6.8) se reduce la forma obişnuită a unei ecuaţii de continuitate

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \nabla_i \cdot \vec{j}_i = 0 , \quad (6.11)$$

unde $\vec{j}_i = \vec{j}_i(\vec{r}_i, t)$ este densitatea curentului de probabilitate datorat mişcării particulei i.

6.2 Sisteme de particule identice

Se consideră că două sau mai multe particule sunt identice dacă toate proprietăţile lor intrinseci (masă, spin, sarcină, etc.) sunt aceleaşi, astfel încât ele nu pot fi deosebite, prin nici un experiment. De aici rezultă că într-un sistem de particule identice putem schimba particulele între ele, fără a influenţa proprietăţile sau evoluţia sistemului. Dacă, din punct de vedere clasic, particulele unui sistem pot fi indexate prin vectorii de poziţie corespunzători, fiecare descriind o traiectorie bine precizată, din punct de vedere cuantic, însă, noţiunea de traiectorie nu are sens – în baza principiului lui Heisenberg – şi particulele îşi pierd identitatea, devenind *indiscernabile*. Astfel, nu există nici o posibilitate de a distinge particulele identice în regiunea din spaţiu în care ele se pot afla simultan, în orice formă de interacţiune mutuală [36].

Fie P_{ij} un operator care interschimbă o pereche de particule identice (fără a le afecta pe celelalte), definit ca

$$P_{ij}\,\psi(\ldots i \ldots j \ldots) = \psi(\ldots j \ldots i \ldots) . \quad (6.12)$$

Din proprietatea evidentă

$$P_{ij}^2\,\psi = \psi , \quad (6.13)$$

rezultă că acest operator este unitar şi că valorile sale proprii sunt $\lambda = \pm 1$. Expresia hamiltonianului ce descrie un sistem de particule identice fiind (vezi (6.4))

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \sum p_k^2 + \sum V_k(\vec{r}_k) + \frac{1}{2} {\sum}' V_{ik}(\vec{r}_i, \vec{r}_k) , \quad (6.14)$$

BUASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

rezultă relaţia de comutare (deoarece $\hat{H}$ nu se modifică dacă schimbăm două particule între ele)

$$\left[\hat{H}\,,\,P_{ik}\right] = 0\,, \tag{6.15}$$

care implică

$$\dot{P}_{ik} = 0\,. \tag{6.16}$$

Astfel, valorile proprii $\lambda = \pm 1$ se păstrează, observabila asociată acestui operator, adică *paritatea*, conservându-se. Stările corespunzătoare valorilor proprii ale lui P_{ik} se numesc *simetrice*, dacă $\lambda = +1$, sau *antisimetrice*, dacă $\lambda = -1$.

Propoziţia 1 *Într-un sistem, toate particulele se găsesc sau în stare simetrică, sau în stare antisimetrică.*

Demonstraţie

Presupunem, prin reducere la absurd, că schimbările succesive $i \leftrightarrow j$ şi $j \leftrightarrow k$ sunt simetrice, iar schimbarea $i \leftrightarrow k$ este antisimetrică. Atunci, relaţiile

$$\begin{aligned}&\psi(\ldots i\ldots j\ldots k\ldots) = \psi(\ldots i\ldots k\ldots j\ldots) = \\ &= \psi(\ldots j\ldots k\ldots i\ldots) = \psi(\ldots k\ldots j\ldots i\ldots) = \\ &= -\psi(\ldots i\ldots j\ldots k\ldots)\end{aligned}$$

ne conduc la concluzia că $\psi = 0$, ceea ce înseamnă că realizarea unei asemenea stări este zero.

q.e.d.

Funcţiile de undă simetrice descriu particule cu spin întreg, numite *bozoni*, iar cele antisimetrice descriu particule cu spin semiîntreg, numite *fermioni*. Observăm că un sistem de particule identice, descris de o funcţie de undă ψ, nu cuprinde, laolaltă, şi bozoni, şi fermioni Această proprietate, de care am ţinut cont când am construit multipleţii (3.138, 140, 141, 145), rezultă şi din teoria grupului Poincaré, asupra căreia vom insista în Capitolul 9.

Cum, în general, funcţia de undă nu prezintă o simetrie particulară, în raport cu permutările diferitelor particule între ele, vom descrie un procedeu de simetrizare şi, respectiv, de antisimetrizare a sa. Astfel, dintr-o funcţie de undă fără proprietăţi de simetrie, $\varphi(1,\ldots,N)$, se poate construi atât forma simetrică

$$\psi_s(1,\ldots,N) = \sum_{(perm.)} \frac{1}{\sqrt{N!}}\varphi(i_1,\ldots,i_N)\,, \tag{6.17}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

cât şi forma antisimetrică

$$\psi_a(1,\ldots,N) = \sum_{(perm.)} \frac{1}{\sqrt{N!}} (-1)^{(paritate)} \varphi(i_1,\ldots,i_N). \tag{6.18}$$

Dacă scriem pe $\varphi(1,\ldots,N)$ ca un produs de stări uniparticulă, adică

$$\varphi(1,\ldots,N) = \varphi_1(1)\,\varphi_2(2)\ldots\varphi_N(N), \tag{6.19}$$

atunci funcţia de undă *total antisimetrică* este dată de următorul determinant

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(1) & \varphi_1(2) & \ldots & \varphi_1(N) \\ \varphi_2(1) & \varphi_2(2) & \ldots & \varphi_2(N) \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \varphi_N(1) & \varphi_N(2) & \ldots & \varphi_N(N) \end{vmatrix}, \tag{6.20}$$

numit *determinantul lui Slater*. Aceasta satisface întru totul *principiul de excluziune*, formulat de *Pauli*, în 1925, care spune că *o stare cuantică individuală dată poate fi ocupată doar de un singur fermion*. Într-adevăr, dacă am avea două particule, i şi k, în aceeaşi stare cuantică χ, adică

$$\varphi_1(i) = \ldots = \varphi_N(i) = \chi(i) \equiv \chi(k) = \varphi_1(k) = \ldots = \varphi_N(k),$$

atunci $\psi_a = 0$, deoarece determinantul are două coloane egale.

Deci un sistem de fermioni identici este caracterizat de o funcţie de undă antisimetrică, ψ_a, iar un sistem de bozoni identici are o funcţie de undă simetrică, ψ_s.

În încheiere, să facem următoarea observaţie: particulele care interacţionează tare, numite *hadroni*, sunt sisteme legate alcătuite din nişte fermioni, cu sarcini fracţionare, numiţi *quark-uri*. Hadronii cuprind mezonii, ca sistem *quark–antiquark* ($q\bar{q}$), şi barionii, ca sistem *quark–quark–quark* (qqq). La început, s-a considerat că există trei quark-uri, $\{u, d, s\}$, caracterizate de funcţia de undă (3.145), şi care se transformă cu ajutorul matricelor Gell–Mann (3.146). În prezent, se cunosc şase quark-uri, grupate în trei familii, adică

$$\begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} t \\ b \end{pmatrix}, \tag{6.21}$$

având sarcinile $+\frac{2}{3}|e|$ (cele de tip *up*, adică u, c, t) şi $-\frac{1}{3}|e|$ (cele de tip *down*, adică d, s, b). În cazul unui mezon, format dintr-un quark şi antiquark-ul său,

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

cei doi fermioni au spinii antiparaleli. În schimb, în cazul unui barion format din trei quark-uri identice (de exemplu, Δ^{++} este o stare legată *uuu*), se pare că avem încălcat principiul lui Pauli, deoarece cel puţin două dintre quark-uri, având spinii paraleli, au toate numerele cuantice egale. Din acest motiv, s-a introdus încă un număr cuantic intern, numit *culoare*, fiecare quark putând avea trei culori diferite, trecerea de la o stare de culoare la alta făcându-se printr-un grup $SU(3)_c$, numit grup $SU(3)$-*colorat*. Quark-urile nu pot exista individual, ci numai grupate, sau *confinate*, în aşa-numiţii *singleţi* de culoare, corespunzători stărilor fizice observabile şi având sarcina electrică întreagă, sarcinile fracţionare nefiind puse în evidenţă experimental.

Recomandând cititorului interesat de fizica quark-urilor bibliografia [1, 22, 41], nu mai insistăm asupra acestor noţiuni, ele fiind obiectul unei discipline separate, numite *Cromodinamică Cuantică* (*QCD*). Aceasta se ocupă de proprietăţile şi interacţiunile quark-urilor colorate, prin intermediul unor câmpuri vectoriale ale căror cuante sunt *gluonii*, aşa cum *Electrodinamica Cuantică* (*QED*) se ocupă de interacţiunile electromagnetice ale particulelor cu sarcină electrică, prin intermediul fotonilor.

6.3 Aproximaţia Born–Oppenheimer

Considerăm un solid descris de hamiltonianul

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\sum_i p_i^2 + \sum_n \frac{1}{2M_n} p_n^2 + \frac{1}{2}{\sum_{i,j}}' \frac{e^2}{r_{ij}} + \frac{1}{2}{\sum_{n,p}}' \frac{Z_n Z_p e^2}{r_{np}} - \sum_{i,n} \frac{Z_n e^2}{r_{in}} \equiv$$

$$\equiv \hat{H}_1 + \hat{H}_2 + \hat{H}_3 + \hat{H}_4 + \hat{H}_5\,, \tag{6.22}$$

în care am inclus termeni cinetici pentru electroni, $\hat{H}_1$, şi pentru nuclee, $\hat{H}_2$, şi termeni de tip energie potenţială coulombiană de interacţiune a electronilor între ei, $\hat{H}_3$, a nucleelor între ele, $\hat{H}_4$, şi a electronilor cu nucleele, $\hat{H}_5$. În ecuaţia Schrödinger

$$\hat{H}|\psi_{total}\rangle = \hat{E}\,|\psi_{total}\rangle \tag{6.23}$$

presupunem că funcţia de undă este "superpoziţia"

$$|\psi_{total}\rangle = |\psi_{nucl}(\vec{r}_n;t)\rangle\,|\psi_{el}(\vec{r}_i,\vec{r}_n)\rangle\,, \tag{6.24}$$

şi că, în $|\psi_{el}\rangle$, poziţiile $\vec{r}_n$ ale nucleelor sunt fixe. În baza acestei ipoteze de cuasistabilitate, este posibil, după cum vom vedea imediat, separarea stărilor

BCUJAS CETATEA UNIVERSITARĂ LIBRARY

cuantice nucleare de cele electronice, adică putem să scriem, pentru acestea din urmă, ecuaţia Schrödinger independentă de timp

$$\left(\hat{H}_1 + \hat{H}_3 + \hat{H}_5\right)|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle\,, \quad |\psi_{el}\rangle = |\psi\rangle, \tag{6.25}$$

cu

$$E = E(\vec{r}_n)\,, \tag{6.26}$$

unde $\vec{r}_n$ sunt trataţi ca nişte parametri. Cu (6.22, 24, 25), ecuaţia (6.23) capătă forma explicită

$$\begin{aligned}
&|\psi_{nucl}\rangle\left(\hat{H}_1 + \hat{H}_3 + \hat{H}_5\right)|\psi\rangle - \\
&- \sum_n \frac{\hbar^2}{2M_n}\left(|\psi\rangle\Delta_n|\psi_{nucl}\rangle + 2\nabla_n|\psi\rangle\,\nabla_n|\psi_{nucl}\rangle + |\psi_{nucl}\rangle\Delta_n|\psi\rangle\right) + \\
&+ \frac{1}{2}{\sum_{n,p}}' \frac{Z_n Z_p e^2}{r_{np}}|\psi\rangle|\psi_{nucl}\rangle = -\frac{\hbar}{i}|\psi\rangle\frac{\partial}{\partial t}|\psi_{nucl}\rangle\,,
\end{aligned} \tag{6.27}$$

pe care o înmulţim scalar cu $\langle\psi|$, integrala efectuându-se numai după coordonatele electronice $\vec{r}_i$ şi, ţinând cont de (6.25), o aducem la forma

$$\begin{aligned}
&E\,|\psi_{nucl}\rangle - \sum_n \frac{\hbar^2}{2M_n}\Delta_n|\psi_{nucl}\rangle - \sum_n \frac{\hbar^2}{M_n}\nabla_n|\psi_{nucl}\rangle\,\langle\psi|\nabla_n|\psi\rangle - \\
&- \sum_n \frac{\hbar^2}{2M_n}|\psi_{nucl}\rangle\,\langle\psi|\Delta_n|\psi\rangle + \frac{1}{2}{\sum_{n,p}}' \frac{Z_n Z_p e^2}{r_{np}}|\psi_{nucl}\rangle = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}|\psi_{nucl}\rangle\,.
\end{aligned} \tag{6.28}$$

Putem neglija termenul al treilea deoarece, dacă ψ este real,

$$\psi^*\nabla_n\psi = \psi\nabla_n\psi = \frac{1}{2}\nabla_n\psi^2$$

şi

$$\int \nabla_n\psi^2\,d\tau = \nabla_n\int \psi^2\,d\tau = 0\,,$$

şi termenul al patrulea deoarece, pentru electronii slab dependenţi de $\vec{r}_n$, avem relaţia

$$\langle\psi|\Delta_n|\psi\rangle \approx 0\,.$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Cu aceste rezultate, ecuaţia (6.28) se reduce la forma

$$\left(\sum_n \frac{\hat{p}_n^2}{2M_n} + \sum_{n,p}{}' \frac{Z_n Z_p e^2}{2\, r_{np}} + E(\vec{r}_n)\right) |\psi_{nucl}\rangle = -\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t}|\psi_{nucl}\rangle\,. \tag{6.29}$$

Studiul acestei ecuaţii aparţine teoriei cuantice a corpului solid.

6.4 Ecuaţia Hartree–Fock

Revenim la ecuaţia (6.25) pe care o scriem sub forma

$$\left[\sum_i \left(\frac{p_i^2}{2m} - \sum_n \frac{Z_n e^2}{r_{in}}\right) + \frac{1}{2}\sum_{i,j}{}' \frac{e^2}{r_{ij}}\right] |\psi\rangle = E\,|\psi\rangle\,, \tag{6.30}$$

respectiv

$$\left[\sum_i \hat{H}^0(\vec{r}_i) + \frac{1}{2}\sum{}' H'(\vec{r}_i, \vec{r}_j)\right] |\psi\rangle = E\,|\psi\rangle\,, \tag{6.31}$$

şi introducem notaţiile

$$\begin{aligned} \hat{H}^0(\vec{r}_i) &= H^0(i) \\ H'(\vec{r}_i, \vec{r}_j) &= H'(i,j) = H'(j,i)\,. \end{aligned} \tag{6.32}$$

Deoarece avem un sistem de electroni, vom alege o funcţie de undă antisimetrică, de forma (6.20), adică

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} |\alpha_1, 1\rangle & |\alpha_2, 1\rangle & \dots & |\alpha_N, 1\rangle \\ |\alpha_1, 2\rangle & |\alpha_2, 2\rangle & \dots & |\alpha_N, 2\rangle \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ |\alpha_1, N\rangle & |\alpha_2, N\rangle & \dots & |\alpha_N, N\rangle \end{vmatrix}, \tag{6.33}$$

unde $\alpha_1, \dots, \alpha_N$ numerotează vectorii de stare unielectronică, iar $1, \dots, N$ corespund coordonatelor $\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N$. Scriem funcţia (6.33) sub forma

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P\, |\alpha_q, 1\rangle |\alpha_s, 2\rangle \dots |\alpha_t, N\rangle\,, \tag{6.34}$$

şi presupunem valabilitatea condiţiilor

$$\langle \alpha_i, k | \alpha_j, k\rangle = \delta_{ij}\,, \quad \text{deci} \quad \langle \psi | \psi\rangle = 1\,. \tag{6.35}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

În scopul utilizării metodei variaţionale, explicităm relaţia

$$\langle \hat{H} \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle \overset{(6.31,32)}{=} \sum_i \langle \psi | \hat{H}^0(i) | \psi \rangle + \frac{1}{2} {\sum_{i,j}}' \langle \psi | H'(i,j) | \psi \rangle . \tag{6.36}$$

Pentru primul termen din membrul drept, obţinem expresia

$$\sum_i \langle \psi | \hat{H}^0(i) | \psi \rangle = N \langle \psi | \hat{H}^0(1) | \psi \rangle =$$

$$= \frac{N}{N!} \sum_{P,P'} (-1)^{P+P'} \langle \alpha_q, 1 | \hat{H}^0(1) | \alpha_{q'}, 1 \rangle \langle \alpha_s, 2 | \alpha_{s'}, 2 \rangle \ldots \langle \alpha_t, N | \alpha_{t'}, N \rangle ,$$

în care ţinem cont de condiţia (6.35), ce implică

$$s = s', \ldots, t = t' \Rightarrow q = q' \Rightarrow P = P' ,$$

şi avem

$$\sum_i \langle \psi | \hat{H}^0(i) | \psi \rangle = \sum_{q=1}^{N} \langle \alpha_q | \hat{H}^0 | \alpha_q \rangle , \tag{6.37}$$

deoarece sunt $(N-1)!$ permutări ale lui $(s, \ldots, t)$.

Cel de al doilea termen din membrul drept al relaţiei (6.36) devine

$${\sum_{i,j}}' \langle \psi | H'(i,j) | \psi \rangle = \frac{1}{2} N(N-1) \langle \psi | H'(1,2) | \psi \rangle , \tag{6.38}$$

adică

$$\langle H' \rangle = \frac{N(N-1)}{2N!} \sum_{P,P'} (-1)^{P+P'} \langle \alpha_q, \alpha_s | H'(1,2) | \alpha_{q'}, \alpha_{s'} \rangle \ldots \langle \alpha_t | \alpha_{t'} \rangle . \tag{6.39}$$

Putem avea următoarele situaţii:

$$(q', s', \ldots, t') = \begin{cases} (q, s, \ldots, t), & \text{cu} \quad P + P' = \text{par} \\ (s, q, \ldots, t), & \text{cu} \quad P + P' = \text{impar} \end{cases}$$

şi (6.39) capătă forma

$$\langle H' \rangle = \frac{1}{2(N-2)!} \times$$

$$\times \sum_P \left[\langle \alpha_q, \alpha_s | H'(1,2) | \alpha_q, \alpha_s \rangle - \langle \alpha_q, \alpha_s | H'(1,2) | \alpha_s, \alpha_q \rangle \right] \langle \alpha_r | \alpha_r \rangle \ldots \langle \alpha_t | \alpha_t \rangle . \tag{6.40}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Ţinând cont că există $(N-2)!$ permutări ale numerelor $(r,\ldots,t)$, obţinem

$$\langle H'\rangle = \frac{1}{2}\sum_{q\neq s}\left[\langle\alpha_q,\alpha_s|H'(1,2)|\alpha_q,\alpha_s\rangle - \langle\alpha_q,\alpha_s|H'(1,2)|\alpha_s,\alpha_q\rangle\right], \quad (6.41)$$

care este echivalentă cu forma

$$\langle H'\rangle = \sum_{q<s}\left[\langle\alpha_q,\alpha_s|H'(1,2)|\alpha_q,\alpha_s\rangle - \langle\alpha_q,\alpha_s|H'(1,2)|\alpha_s,\alpha_q\rangle\right]. \quad (6.42)$$

Utilizând aceste rezultate, expresia (6.36), cu notaţii simplificatoare, devine

$$E = \langle H\rangle = \sum_i \langle i|H^0|i\rangle + \frac{1}{2}\sum_{i,j}\left[\langle i,j|H'|i,j\rangle - \langle i,j|H'|j,i\rangle\right]. \quad (6.43)$$

Revenind la metoda variaţională care impune relaţiile

$$\delta E = 0\,;\ \ \delta\langle i|j\rangle = 0\,, \quad (6.44)$$

ce pot fi scrise, cu ajutorul multiplicatorilor Lagrange, în forma

$$\delta\left[E - \sum_{i,j}\varepsilon_{ij}\,\langle i|j\rangle\right] = 0\,, \quad (6.45)$$

să calculăm variaţia membrului drept al expresiei (6.43), adică

$$\begin{aligned}
&\delta\langle i|H^0|i\rangle = \langle\delta i|H^0|i\rangle\\
&\delta\langle i,j|H'|k,l\rangle = \langle\delta i,j|H'|k,l\rangle \equiv \langle\delta i|v_{jl}|k\rangle\\
&\delta\langle i|j\rangle = \langle\delta i|j\rangle\,,
\end{aligned} \quad (6.46)$$

unde am variat numai vectorul *bra* $\langle i|$, cu i fixat şi am introdus notaţia

$$v_{jl} = \langle j|H'|l\rangle\,. \quad (6.47)$$

În sfârşit, din relaţiile (6.43–47), rezultă expresia

$$\langle\delta i|\left[\hat{H}^0|i\rangle + \sum_j\left(v_{jj}|i\rangle - v_{ji}|j\rangle\right) - \sum_j\varepsilon_{ji}|j\rangle\right] = 0\,,$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

care pune în evidenţă *ecuaţia Hartree–Fock*

$$\hat{H}^0|i\rangle + \sum_j (v_{jj}|i\rangle - v_{ji}|j\rangle) - \sum_j \varepsilon_{ji}|j\rangle = 0. \tag{6.48}$$

Termenul $\sum v_{ji}|j\rangle$, aşa-numit *termen j de energie de schimb*, se datorează principiului de excluziune, al lui Pauli. Importanţa acestui termen într-o serie de procese cuantice (de exemplu, în explicarea feromagnetismului) confirmă obiectivitatea principiului indiscernabilităţii particulelor identice.

6.5 Molecula de hidrogen. Starea fundamentală

Considerăm următoarea distribuţie a particulelor în molecula de hidrogen (vezi figura 6.1 din **Anexa B**). Pentru R fixat, hamiltonianul sistemului celor doi electroni, adică

$$H = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_{a1}} - \frac{e^2}{r_{b2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} - \frac{e^2}{r_{a2}} + \frac{e^2}{r_{12}}, \tag{6.49}$$

este compus, în cazul a., din următorii trei termeni,

$$H = H_a(1) + H_b(2) + W(1,2), \tag{6.50}$$

cu

$$\begin{aligned} H_a(1) &= \frac{p_1^2}{2m} - \frac{e^2}{r_{a1}} \\ H_b(2) &= \frac{p_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_{b2}} \\ W(1,2) &= -\frac{e^2}{r_{a2}} - \frac{e^2}{r_{b1}} + \frac{e^2}{r_{12}}, \end{aligned} \tag{6.51}$$

sau, în cazul figurii b., din termenii

$$H = H_a(2) + H_b(1) + W(2,1), \tag{6.52}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

cu

$$H_a(2) = \frac{p_2^2}{2m} - \frac{e^2}{r_{a2}}$$
$$H_b(1) = \frac{p_1^2}{2m} - \frac{e^2}{r_{b1}}$$
$$W(2,1) = -\frac{e^2}{r_{a1}} - \frac{e^2}{r_{b2}} + \frac{e^2}{r_{12}}. \tag{6.53}$$

Evident, simbolul de operator se subînţelege oriunde este cazul.

În expresia (6.50), considerăm termenul $W(1,2)$ ca o perturbaţie, iar pentru ecuaţia neperturbată, adică

$$[H_a(1) + H_b(2)]\,|\psi_{01}(1,2)\rangle = E_0|\psi_{01}(1,2)\rangle\,, \tag{6.54}$$

scriem soluţia ca un produs tensorial,

$$|\psi_{01}(1,2)\rangle = |a,1\rangle|b,2\rangle\,, \tag{6.55}$$

al soluţiilor ecuaţiilor uzuale, de la atomul de hidrogen,

$$H_a(1)|a,1\rangle = -E_H|a,1\rangle$$
$$H_b(2)|b,2\rangle = -E_H|b,2\rangle\,, \tag{6.56}$$

E_H fiind valoarea absolută a energiei în starea fundamentală a electronului în atomul de hidrogen.

În mod analog, pentru despicarea (6.52) a hamiltonianului, problema neperturbată,

$$[H_a(2) + H_b(1)]\,|\psi_{02}(1,2)\rangle = E_0|\psi_{02}(1,2)\rangle\,, \tag{6.57}$$

admite soluţia

$$|\psi_{02}(1,2)\rangle = |a,2\rangle|b,1\rangle\,, \tag{6.58}$$

unde

$$H_a(2)|a,2\rangle = -E_H|a,2\rangle$$
$$H_b(1)|b,1\rangle = -E_H|b,1\rangle\,. \tag{6.59}$$

În ambele cazuri, avem următoarea expresie a energiei nivelului fundamental neperturbat, pentru molecula de hidrogen:

$$E_0 = -2\,E_H\,. \tag{6.60}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

În ceea ce priveşte hamiltonianul total, vom căuta soluţia ecuaţiei

$$H|\psi(1,2)\rangle = E\,|\psi(1,2)\rangle \tag{6.61}$$

sub forma

$$|\psi(1,2)\rangle = c_1|\psi_{01}\rangle + c_2|\psi_{02}\rangle + |\varphi\rangle\,, \tag{6.62}$$

unde $|\varphi\rangle$ este corecţia datorată perturbaţiei. Convenim să păstrăm numai primul ordin al aproximaţiei, deci vom neglija termenii în

$$W(1,2)|\varphi\rangle\,,\quad W(2,1)|\varphi\rangle\,,\quad \varepsilon|\varphi\rangle\,, \tag{6.63}$$

semnificaţia lui ε fiind de corecţie la nivelul fundamental, adică

$$E = -2E_H + \varepsilon\,. \tag{6.64}$$

Substituind (6.62) şi (6.64) în (6.61), rezultă ecuaţia

$$\begin{aligned} &c_1H|\psi_{01}\rangle + c_2H|\psi_{02}\rangle + H|\varphi\rangle = \\ &= -2E_H\,(c_1|\psi_{01}\rangle + c_2|\psi_{02}\rangle + |\varphi\rangle) + \varepsilon\,(c_1|\psi_{01}\rangle + c_2|\psi_{02}\rangle + |\varphi\rangle)\,, \end{aligned} \tag{6.65}$$

în care înlocuim, în mod convenabil, pe H cu expresiile (6.50) sau (6.52). Astfel, obţinem

$$\begin{aligned} &c_1\left[\underbrace{H_a(1)+H_b(2)}_{(6.54)}+W(1,2)\right]|\psi_{01}\rangle + \\ &+c_2\left[\underbrace{H_a(2)+H_b(1)}_{(6.57)}+W(2,1)\right]|\psi_{02}\rangle + \\ &+\left[H_a(1)+H_b(2)\right]|\varphi\rangle + \underbrace{W(1,2)|\varphi\rangle}_{(6.63)} = \\ &= -2E_H\left(c_1|\underbrace{\psi_{01}}_{(6.54)}\rangle + c_2|\underbrace{\psi_{02}}_{(6.57)}\rangle\right) + \\ &+\varepsilon\,(c_1|\psi_{01}\rangle + c_2|\psi_{02}\rangle) + \left(-2E_H + \underbrace{\varepsilon}_{(6.63)}\right)|\varphi\rangle\,, \end{aligned} \tag{6.66}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

unde am indicat termenii care se reduc, în baza relaţiilor (6.54), (6.57) sau se neglijează (vezi (6.63)). Ecuaţia (6.66) devine

$$[H_a(1) + H_b(2) + 2E_H]\,|\varphi\rangle = \\ = [\varepsilon - W(1,2)]\,c_1|\psi_{01}\rangle + [\varepsilon - W(2,1)]\,c_2|\psi_{02}\rangle\,, \tag{6.67}$$

de unde, prin înmulţire la stânga cu $\langle\psi_{01}|$ şi ţinând cont de (6.54) şi (6.60), rezultă

$$c_1\,(\varepsilon - \langle\psi_{01}|W(1,2)|\psi_{01}\rangle) + c_2\,\varepsilon\langle\psi_{01}|\psi_{02}\rangle - c_2\,\langle\psi_{01}|W(2,1)|\psi_{02}\rangle = 0\,. \tag{6.68}$$

În mod analog, aplicând lui $|\varphi\rangle$ din (6.65) hamiltonianul (6.54), obţinem relaţia

$$[H_a(2) + H_b(1) + 2E_H]\,|\varphi\rangle = \\ = [\varepsilon - W(1,2)]\,c_1|\psi_{01}\rangle + [\varepsilon - W(2,1)]\,c_2|\psi_{02}\rangle\,, \tag{6.69}$$

de unde, prin înmulţire la stânga cu $\langle\psi_{02}|$ rezultă analogul relaţiei (6.68), adică

$$c_1\,\varepsilon\langle\psi_{02}|\psi_{01}\rangle - c_1\langle\psi_{02}|W(1,2)|\psi_{01}\rangle + c_2\,\varepsilon - c_2\langle\psi_{02}|W(2,1)|\psi_{02}\rangle = 0\,. \tag{6.70}$$

Introducând notaţiile

$$K = \langle\psi_{01}|W(1,2)|\psi_{01}\rangle = \langle\psi_{02}|W(2,1)|\psi_{02}\rangle\,, \\ A = \langle\psi_{02}|W(1,2)|\psi_{01}\rangle = \langle\psi_{01}|W(2,1)|\psi_{02}\rangle\,, \\ S^2 = \langle\psi_{01}|\psi_{02}\rangle = \langle\psi_{02}|\psi_{01}\rangle\,, \tag{6.71}$$

pentru ψ_{01}, ψ_{02} reali, ecuaţiile (6.68) şi (6.70) conduc la sistemul omogen

$$(\varepsilon - K)c_1 + (\varepsilon\,S^2 - A)c_2 = 0 \\ (\varepsilon\,S^2 - A)c_1 + (\varepsilon - K)c_2 = 0\,, \tag{6.72}$$

care admite soluţii nebanale pentru c_1 şi c_2 dacă determinantul caracteristic este nul, adică

$$(\varepsilon - K)^2 = (\varepsilon S^2 - A)^2\,. \tag{6.73}$$

Cele două soluţii ale ecuaţiei (6.73) sunt:

$$\varepsilon_1 = \frac{K - A}{1 - S^2}\,, \tag{6.74}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

implicând $c_1 = -c_2$, şi

$$\varepsilon_2 = \frac{K + A}{1 + S^2}, \tag{6.75}$$

implicând $c_1 = c_2$. Funcţiile de stare corespunzătoare (în aproximaţia de ordin zero) sunt, respectiv,

$$\kappa_a |\psi_a\rangle = |\psi_{01}\rangle - |\psi_{02}\rangle \tag{6.76}$$

şi

$$\kappa_s |\psi_s\rangle = |\psi_{01}\rangle + |\psi_{02}\rangle\,, \tag{6.77}$$

prima fiind antisimetrică, iar a doua fiind simetrică. Coeficienţii de normare, κ_a şi κ_s, se determină din condiţia

$$\kappa_a^2 = (\langle\psi_{01}| - \langle\psi_{02}|)\,(|\psi_{01}\rangle - |\psi_{02}\rangle) = 2 - 2S^2$$

şi analoaga sa, şi au valorile

$$\begin{aligned} \kappa_a^2 &= 2(1 - S^2) \\ \kappa_s^2 &= 2(1 + S^2)\,. \end{aligned} \tag{6.78}$$

De asemenea, mai putem scrie

$$S^4 = \langle\psi_{01}|\psi_{02}\rangle^2 \leq \langle\psi_{01}|\psi_{01}\rangle\langle\psi_{02}|\psi_{02}\rangle = 1$$

care implică – ψ_{01} şi ψ_{02} fiind funcţii reale –

$$0 \leq S^2 \leq 1\,. \tag{6.79}$$

În încheiere, să discutăm energia moleculei de hidrogen, adică

$$U(R) = \frac{e^2}{R} + E(R) = \frac{e^2}{R} - 2E_H + \varepsilon(R)\,, \tag{6.80}$$

care, pentru soluţiile (6.74) şi (6.75), capătă expresiile

$$\begin{aligned} U_a &= -2E_H + \frac{e^2}{R} + \frac{K - A}{1 - S^2} = \\ &= -2\,E_H + \left(\frac{e^2}{R} + K\right) - A + S^2\,\frac{K - A}{1 - S^2}\,, \end{aligned} \tag{6.81}$$

$$\begin{aligned} U_s &= -2E_H + \frac{e^2}{R} + \frac{K + A}{1 + S^2} = \\ &= -2\,E_H + \left(\frac{e^2}{R} + K\right) + A - S^2\,\frac{K + A}{1 + S^2}\,, \end{aligned} \tag{6.82}$$

semnificaţia termenilor fiind următoarea:

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$-2E_H$ este energia neperturbată a doi atomi de hidrogen,

$\frac{e^2}{R} + K$ este energia coulombiană medie a atomilor de hidrogen, la distanţa R,

A este aşa-numita *energie de schimb*, care nu poate fi obţinută decât prin intermediul Mecanicii Cuantice, neavând analog clasic,

$\pm\frac{K\mp A}{1\mp S^2}S^2$ este corecţia la energie, datorată neortogonalităţii vectorilor $|\psi_{01}\rangle$ şi $|\psi_{02}\rangle$.

Aproximaţia dată de Heitler şi London împreună cu evaluarea lui K, A, şi S^2 a lui Sugiura, în 1927, au condus la figura 6.2, din **Anexa B**. După cum se vede, molecula de hidrogen va fi stabilă pentru ψ_s, deoarece în acest caz avem un minim al energiei, la distanţa R_0 între nuclee [38].

Pentru a înţelege stările electronice de energie minimă, să analizăm simetriile hamiltonianul (6.49). Astfel, acesta este simetric la reflexia faţă de punctul din mijlocul lui R, ceea ce implică existenţa funcţiilor de stare pare şi impare, corespunzătoare valorilor proprii ± 1 ale operatorului P_{12}, care schimbă numerele cuantice ale celor doi electroni, adică

$$P_{12}|\vec{r}_1, s_1, \vec{r}_2, s_2\rangle = |\vec{r}_2, s_2, \vec{r}_1, s_1\rangle\,. \tag{6.83}$$

În (6.83) am utilizat o funcţie de undă totală

$$|\psi_{total}\rangle = |\psi\rangle|\chi(s_1, s_2)\rangle\,, \tag{6.84}$$

în care am inclus şi un factor de spin. În baza principiului lui Pauli, aceasta trebuie să fie antisimetrică, deci poate avea una dintre formele

$$|\psi_{total}\rangle^{+} = |\psi_s\rangle|\chi_a(s_1, s_2)\rangle\,, \tag{6.85}$$

sau

$$|\psi_{total}\rangle^{-} = |\psi_a\rangle|\chi_s(s_1, s_2)\rangle\,, \tag{6.86}$$

dintre care stabilitate avem pentru expresia (6.85), adică pentru cazul în care spinii celor doi electroni sunt antiparaleli.

De asemenea, hamiltonianul (6.49) este simetric la rotaţia faţă de axa R, conducând la conservarea componentei corespunzătoare, pe această axă, a momentului cinetic orbital al electronilor. Stările de moment cinetic orbital nul se notează cu Σ, iar cele cu momentul cinetic orbital în lungul lui R egal cu

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

unu se notează cu Π. Starea de energie minimă corespunde cazului (6.85) şi se notează cu $^1\Sigma_s$, deoarece implică o stare $|\psi\rangle$ simetrică şi o componentă de spin $|\chi\rangle$ antisimetrică, asociate unui singlet $s = 0$. Celălalt caz, descris de (6.86), corespunde unei stări notate cu $^3\Sigma_a$. Aplicarea principiului variaţional arată că energia corespunzătoare lui $^1\Sigma_s$ este inferioară celei corespunzătoare stării $^3\Sigma_a$, ca în figura precedentă, în care se observă că, în cazul $^3\Sigma_a$, energia potenţială de repulsie dintre cei doi protoni depăşeşte pe cea a atomilor de hidrogen neperturbaţi, în timp ce, în starea $^1\Sigma_s$, concentrarea sarcinii electronice între protoni, ca rezultat al termenului mixt din $||\psi_{total}\rangle^+|^2$, conduce la o atracţie, micşorând energia. Pentru starea $^1\Sigma_s$, energia electronică poate fi aproximată de parabola

$$U(R) = U(R_0) + \frac{1}{2}k\,(R - R_0)^2\,, \tag{6.87}$$

unde minimul corespunde distanţei de separare

$$R_0 = 0,74\ \mathring{\text{A}} = 7,4 \times 10^{-9}\ \text{cm}\,, \tag{6.88}$$

curbura fiind

$$k = 35\,\text{eV}\ \mathring{\text{A}}^{-2}\,, \tag{6.89}$$

iar valoarea minimă a energiei

$$U(R_0) = -\,4,746\,\text{eV}\,. \tag{6.90}$$

6.6 Cuplajul de spin Heisenberg

Considerăm doi atomi identici, ce nu interacţionează, ale căror stări individuale sunt descrise de ecuaţiile

$$\begin{aligned} \hat{H}_0^{(1)}|\psi_n(1)\rangle &= E_n|\psi_n(1)\rangle \\ \hat{H}_0^{(2)}|\psi_m(2)\rangle &= E_m|\psi_m(2)\rangle\,. \end{aligned} \tag{6.91}$$

Sistemul necuplat este caracterizat de una dintre stările

$$|\psi_1\rangle = |\psi_n(1)\rangle|\psi_m(2)\rangle \tag{6.92}$$

sau

$$|\psi_2\rangle = |\psi_m(1)\rangle|\psi_n(2)\rangle \tag{6.93}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

care satisfac aceeaşi ecuaţie, anume

$$\left(\hat{H}_0^{(1)} + \hat{H}_0^{(2)}\right)_{|\psi_2\rangle}^{|\psi_1\rangle} = (E_n + E_m)_{|\psi_2\rangle}^{|\psi_1\rangle}\,, \tag{6.94}$$

sau

$$\hat{H}_0|\psi_\alpha\rangle = E|\psi_\alpha\rangle\,,\ \ \alpha = 1,2\,, \tag{6.95}$$

unde

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_0^{(1)} + \hat{H}_0^{(2)}\ \ ;\ \ E = E_n + E_m\,. \tag{6.96}$$

În cazul $n \neq m$, avem o dublă degenerare de schimb. Dacă între cei doi atomi apare o interacţiune, de exemplu, de tip coulombian, descrisă de hamiltonianul

$$H^i = \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}\,, \tag{6.97}$$

degenerarea se ridică. Presupunând realizată ortogonalizarea

$$\langle\psi_\alpha|\psi_\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}\,, \tag{6.98}$$

vectorul de stare al stării cuplate, în aproximaţia de ordin zero, este

$$|\psi\rangle = a\,|\psi_1\rangle + b\,|\psi_2\rangle\ \ ;\ \ |a|^2 + |b|^2 = 1\,, \tag{6.99}$$

satisfăcând, în mod aproximativ, ecuaţia

$$\left(\hat{H}_0 + H^i\right)|\psi\rangle = \varepsilon\,|\psi\rangle\,, \tag{6.100}$$

ε fiind energia. Prin înmulţirea relaţiei (6.100), succesiv, cu $\langle\psi_1|$ şi cu $\langle\psi_2|$, obţinem

$$\begin{aligned} a\langle\psi_1|\left(\hat{H}_0 + H^i\right)|\psi_1\rangle + b\langle\psi_1|\left(\hat{H}_0 + H^i\right)|\psi_2\rangle &= \varepsilon a \\ a\langle\psi_2|\left(\hat{H}_0 + H^i\right)|\psi_1\rangle + b\langle\psi_2|\left(\hat{H}_0 + H^i\right)|\psi_2\rangle &= \varepsilon b\,. \end{aligned} \tag{6.101}$$

Ecuaţiile (6.95) şi condiţia de ortonormare (6.98) ne conduc la relaţiile

$$\langle\psi_1|\hat{H}_0|\psi_2\rangle = \langle\psi_2|\hat{H}_0|\psi_1\rangle = E\langle\psi_1|\psi_2\rangle = 0 \tag{6.102}$$

şi

$$\langle\psi_1|\hat{H}_0|\psi_1\rangle = \langle\psi_2|\hat{H}_0|\psi_2\rangle = E\,, \tag{6.103}$$

BCUIAS / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi, introducând notaţia

$$\langle\psi_\alpha|H^i|\psi_\beta\rangle = H^i_{\alpha\beta}\,, \tag{6.104}$$

sistemul (6.101) devine

$$\begin{aligned}\left(E + H^i_{11} - \varepsilon\right) a + H^i_{12} b &= 0\\ H^i_{21} a + \left(E + H^i_{22} - \varepsilon\right) b &= 0\end{aligned} \tag{6.105}$$

şi admite soluţii nebanale dacă este satisfăcută condiţia

$$\begin{vmatrix} E + H^i_{11} - \varepsilon & H^i_{12} \\ H^i_{21} & E + H^i_{22} - \varepsilon \end{vmatrix} = 0\,. \tag{6.106}$$

Datorită indiscernabilităţii celor două particule, putem introduce notaţiile

$$\begin{aligned} H^i_{11} &= H^i_{22} \equiv H_+\\ H^i_{12} &= H^i_{21} \equiv H_-\,, \end{aligned} \tag{6.107}$$

cu ajutorul cărora ecuaţia (6.106) devine

$$(E + H_+ - \varepsilon)^2 = H_-^2\,, \tag{6.108}$$

cu soluţiile

$$\varepsilon_\pm = E + H_+ \pm H_-\,. \tag{6.109}$$

Înlocuind relaţiile

$$E + H_+ - \varepsilon_\pm = \mp H_-$$

în sistemul (6.105) şi ţinând cont de condiţia $a^2 + b^2 = 1$, rezultă:

$$\begin{aligned} \varepsilon = \varepsilon_+ \;&\Rightarrow\; -a + b = 0 \;\Rightarrow\; a = b = 1/\sqrt{2}\\ \varepsilon = \varepsilon_- \;&\Rightarrow\; a + b = 0 \;\Rightarrow\; a = -b = 1/\sqrt{2}\,, \end{aligned} \tag{6.110}$$

cu vectorii de stare corespunzători

$$\begin{aligned} |\psi_+\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle\right), \quad \text{pentru} \quad \varepsilon = \varepsilon_+\\ |\psi_-\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\psi_1\rangle - |\psi_2\rangle\right), \quad \text{pentru} \quad \varepsilon = \varepsilon_-\,. \end{aligned} \tag{6.111}$$

BCU IAŞI, CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Presupunând că atomii au câte un singur electron cu spin necompensat, astfel încât spinul total

$$S = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases}$$

are proiecţiile

$$S_z = \begin{cases} 0 \\ 1,\ 0,\ -1 \end{cases},$$

componenta de spin a vectorului de stare va fi:

$$|\chi(S)\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}\{(\uparrow\downarrow) - (\downarrow\uparrow)\} & ;\ S_z = 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\{(\uparrow\downarrow) + (\downarrow\uparrow)\} & ;\ S_z = 0 \\ (\uparrow\uparrow) & ;\ S_z = 1 \\ (\downarrow\downarrow) & ;\ S_z = -1\,, \end{cases} \tag{6.112}$$

conducând la o funcţie de undă *totală* de forma

$$\begin{cases} |\psi_{(1)}\rangle = |\psi_+\rangle|\chi(S)\rangle, & \text{pentru} \quad S = 0 \\ |\psi_{(3)}\rangle = |\psi_-\rangle|\chi(S)\rangle, & \text{pentru} \quad S = 1\,, \end{cases} \tag{6.113}$$

cu energiile corespunzătoare

$$\varepsilon = \begin{cases} \varepsilon_{(1)} = \varepsilon_+ = E + H_+ + H_-\,, & \text{pentru} \quad S = 0 \\ \varepsilon_{(3)} = \varepsilon_- = E + H_+ - H_-\,, & \text{pentru} \quad S = 1\,. \end{cases} \tag{6.114}$$

Relaţiile (6.114) pot fi scrise, comprimat, sub forma

$$\varepsilon_\mp = E + H_+ - \kappa H_-\,, \tag{6.115}$$

unde mărimea κ, având valorile

$$\kappa = \begin{cases} 1\,, & \text{pentru} \quad S = 1 \\ -1\,, & \text{pentru} \quad S = 0\,, \end{cases} \tag{6.116}$$

poate fi legată de operatorii de spin. Pentru aceasta, pornind de la valoarea medie a spinului total, adică

$$\langle(\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2\rangle = S(S+1) = \begin{cases} 2\,, & \text{pentru} \quad S = 1 \\ 0\,, & \text{pentru} \quad S = 0\,, \end{cases} \tag{6.117}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi de la valorile medii ale spinilor celor doi electroni, adică

$$\langle S_1\rangle^2 = \langle S_2\rangle^2 = S_1(S_1+1) = \frac{3}{4}, \tag{6.118}$$

obţinem, pentru produsul scalar

$$2\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2 = (\vec{S}_1+\vec{S}_2)^2 - S_1^2 - S_2^2,$$

valoarea medie

$$2\langle\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2\rangle = \begin{cases} 2-\frac{3}{2} = \frac{1}{2}, & \text{pentru } S=1 \\ 0-\frac{3}{2} = -\frac{3}{2}, & \text{pentru } S=0, \end{cases} \tag{6.119}$$

ceea ce ne permite să îl scriem pe κ sub forma

$$\kappa = \frac{1}{2} + 2\langle\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2\rangle. \tag{6.120}$$

Înlocuind această formulă în (6.115), obţinem relaţia

$$\varepsilon = E + H_+ - \frac{1}{2}H_- - 2\langle\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2\rangle H_-, \tag{6.121}$$

în care ultimul termen exprimă *cuplajul de spin Heisenberg.* Acest cuplaj a condus la teoria cuantică a feromagnetismului.

6.7 Interacţiunea spin–orbită

Interacţiunea spin–orbită poate fi explicată consecvent numai în cadrul teoriei cuantice relativiste a electronului, adică pe baza ecuaţiei lui Dirac. Datorită importanţei sale, prezentăm aici o explicaţie simplificată a acestei interacţiuni.

Pentru ionul hidrogenoid, format din nucleu (cu sarcina $Z|e|$) şi electron (cu sarcina elementară e), ne situăm în reperul legat de electron. Astfel, nucleul se mişcă cu viteza $-\vec{v}$, unde $\vec{v}$ este viteza electronului, şi generează un câmp magnetic de inducţie [36]

$$\vec{B} = \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{-Z|e|\,\vec{v}\times\vec{r}}{r^3} = \frac{\mu_0 Z|e|}{4\pi}\frac{\vec{r}\times\vec{v}}{r^3}, \tag{6.122}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

adică, înmulţind şi împărţind cu masa m a electronului, rezultă

$$\vec{B} = \frac{\mu_0 Z|e|}{4\pi\, mr^3}\,\vec{L}\,, \tag{6.123}$$

unde $\vec{L} = \vec{r} \times m\vec{v}$. Electronul, de moment magnetic propriu

$$\vec{M} = 2\,\frac{e\hbar}{2m}\vec{s}\,, \tag{6.124}$$

situat în acest câmp, va avea o energie

$$W_1 = -\vec{M}\cdot\vec{B} = \left(-\frac{e\hbar}{m}\,\vec{s}\right)\cdot\left(\frac{\mu_0 Z|e|}{4\pi\, mr^3}\,\hbar\vec{l}\right). \tag{6.125}$$

Deoarece, în reperul legat de nucleu, avem $W_2 = 0$, vom considera ca *energie a interacţiunii spin–orbită*, valoarea medie

$$W = \frac{W_1 + W_2}{2}\,,$$

adică

$$W = \frac{\mu_0 Z e^2\hbar^2}{8\pi\, m^2}\,\frac{1}{r^3}\,(\vec{l}\cdot\vec{s})\,. \tag{6.126}$$

Această energie joacă un rol important în explicarea mai multor efecte, cum ar fi, de exemplu, structura fină a spectrului.

6.8 Cuplajul a două momente cinetice

Fie două momente cinetice, $\vec{J}_1$ şi $\vec{J}_2$, al căror cuplaj este

$$\vec{J} = \vec{J}_1 I_2 + \vec{J}_2 I_1 = \vec{J}_1 + \vec{J}_2\,, \tag{6.127}$$

acţionând în spaţiul $\mathcal{S} = \mathcal{S}_1 \otimes \mathcal{S}_2$, iar I_1 şi I_2 sunt operatorii unitate în cele două spaţii. Considerăm cuplajul celor două momente cinetice în care j_1 şi j_2 sunt fixaţi. Baza în $\mathcal{S}$ fiind $|j_1 m_1\rangle|j_2 m_2\rangle$, cu j_1 şi j_2 daţi, putem scrie un vector propriu comun operatorilor J_z şi J^2 sub forma

$$|jm\rangle = \sum_{m_1,m_2} C^{j_1\ j_2\ j}_{m_1\ m_2\ m}\,|j_1 m_1\rangle|j_2 m_2\rangle\,, \tag{6.128}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

unde $C^{j_1\ j_2\ j}_{m_1\ m_2\ m}$ poartă numele de *coeficienţi Clebsch–Gordan.*[1] Momentul cinetic total, $\vec{J}$, satisface aceleaşi reguli de comutare ca şi $\vec{J}_1$ şi $\vec{J}_2$. Acţionăm asupra relaţiei (6.128) cu operatorul $J_z = J_{1z} + J_{2z}$ şi obţinem

$$m|jm\rangle = \sum_{m_1,m_2} C^{j_1\ j_2\ j}_{m_1\ m_2\ m}(m_1+m_2)|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle\,,$$

de unde, utilizând (6.128), avem

$$\sum_{m_1,m_2} C^{j_1\ j_2\ j}_{m_1\ m_2\ m}(m-m_1-m_2)|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle = 0 \tag{6.129}$$

şi, cum vectorii bazei sunt independenţi, rezultă relaţia

$$m = m_1 + m_2\,. \tag{6.130}$$

Pentru j_1 şi j_2 fixaţi, m_1 şi m_2 iau $2j_1+1$ şi, respectiv, $2j_2+1$ valori, deci avem $(2j_1+1)(2j_2+1)$ vectori ai bazei $|j_1m_1\rangle|j_2m_2\rangle$, deci şi ai bazei $|jm\rangle$, definită prin (6.128). Atunci, relaţia

$$\sum_{j_{min}}^{j_{max}}(2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1)\,,$$

adică

$$\frac{1}{2}\left[(2j_{min}+1)+(2j_{max}+1)\right]\left[j_{max}-(j_{min}-1)\right] = (2j_1+1)(2j_2+1)\,,$$

în ipoteza $j_{max} = j_1 + j_2$, devine

$$(j_1+j_2+1+j_{min})\,(j_1+j_2+1-j_{min}) = (2j_1+1)(2j_2+1)\,,$$

conducându-ne la o valoare minimă a numărului cuantic j de forma

$$j_{min} = |j_1 - j_2|\,. \tag{6.131}$$

Relaţia (6.128) ne furnizează următoarele două rezultate importante.

[1] În tratatele moderne, dedicate fizicii particulelor elementare, se mai utilizează, pentru coeficienţii Clebsch–Gordan, notaţia $\langle j_1m_1j_2m_2|jm\rangle$.

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

1. Din condiţia de ortonormare $\langle jm|jm\rangle = 1$, rezultă relaţia

$$\sum_{m_1} \left| C^{j_1\ j_2\ j}_{m_1\ m-m_1\ m} \right|^2 = 1\,, \tag{6.132}$$

indicându-ne faptul că mărimea $\left| C^{j_1\ j_2\ j}_{m_1\ m-m_1\ m} \right|^2$ exprimă ponderea cu care momentele cinetice, în stările $|j_1 m_1\rangle$ şi $|j_2 m_2\rangle$, se cuplează în momentul cinetic $|jm\rangle$.

2. Pentru valoarea maximă a lui m, relaţiile (6.128) şi (6.132) devin

$$|jj\rangle = C^{j_1\ j_2\ j}_{j_1\ j_2\ j} |j_1 j_1\rangle |j_2 j_2\rangle \tag{6.133}$$

şi

$$\left| C^{j_1\ j_2\ j}_{j_1\ j_2\ j} \right|^2 = 1\,, \tag{6.134}$$

permiţându-ne să alegem, în lipsa altor condiţii, valoarea

$$C^{j_1\ j_2\ j}_{j_1\ j_2\ j} = 1\,,\quad j_1 + j_2 = j\,, \tag{6.135}$$

consecinţă a *condiţiei de fază*, de unde rezultă că toţi *coeficienţii Clebsch–Gordan sunt reali.*

În ceea ce priveşte restul coeficienţilor Clebsch–Gordan, aceştia pot fi obţinuţi din relaţia (6.133), cu (6.134), adică

$$|jj\rangle = |j_1 j_1\rangle |j_2 j_2\rangle\,,\quad j = j_1 + j_2\,, \tag{6.136}$$

prin aplicarea operatorului $J_- = J_{1-} + J_{2-}$ asupra relaţiei (6.136), adică

$$J_- |jj\rangle = |j_1 j_1\rangle J_{2-} |j_2 j_2\rangle + (J_{1-} |j_1 j_1\rangle)\, |j_2 j_2\rangle\,,$$

de unde, ţinând cont de (3.129), obţinem

$$\sqrt{2j}\, |j\, j-1\rangle = \sqrt{2j_2}\, |j_1 j_1\rangle |j_2\, j_2 - 1\rangle + \sqrt{2j_1}\, |j_1\, j_1 - 1\rangle |j_2\, j_2\rangle\,,$$

sau

$$|j_1 + j_2\,,\, j_1 + j_2 - 1\rangle = \\ = \sqrt{\frac{j_2}{j_1 + j_2}}\, |j_1 j_1\rangle |j_2\, j_2 - 1\rangle + \sqrt{\frac{j_1}{j_1 + j_2}}\, |j_1 j_1 - 1\rangle |j_2\, j_2\rangle\,. \tag{6.137}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Comparând ultima relaţie cu (6.128), identificăm următorii coeficienţi Clebsch–Gordan:

$$C^{j_1\ j_2\ j_1+j_2}_{j_1\ j_2-1\ j_1+j_2-1} = \sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}},$$
$$C^{j_1\ j_2\ j_1+j_2}_{j_1-1\ j_2\ j_1+j_2-1} = \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}. \qquad (6.138)$$

Aplicând, succesiv, operatorul J_- relaţiei (6.137), obţinem şi restul coeficienţilor Clebsch–Gordan de tipul $C^{j_1\ j_2\ j_1+j_2}$.

Să considerăm acum vectorul

$$|j_1+j_2-1,\ j_1+j_2-1\rangle = a\,|j_1 j_1\rangle|j_2\ j_2-1\rangle + b\,|j_1\ j_1-1\rangle|j_2\ j_2\rangle \qquad (6.139)$$

din a cărui ortogonalitate pe vectorul (6.137) obţinem relaţia

$$\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}\,a + \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}}\,b = 0,$$

care, împreună cu $a^2+b^2=1$, ne conduce la următoarele expresii ale coeficienţilor a şi b:

$$a = C^{j_1\ j_2\ j_1+j_2-1}_{j_1\ j_2-1\ j_1+j_2-1} = \sqrt{\frac{j_1}{j_1+j_2}},$$
$$b = C^{j_1\ j_2\ j_1+j_2-1}_{j_1-1\ j_2\ j_1+j_2-1} = -\sqrt{\frac{j_2}{j_1+j_2}}, \qquad (6.140)$$

unde am ales semnele în concordanţă cu *condiţia* completă *de fază* care impune

$$C^{j_1 j_2 j}_{j_1 m_2 j} > 0\,. \qquad (6.141)$$

Astfel, pas cu pas, putem obţine toţi coeficienţii Clebsch–Gordan.

Metoda prezentată este practică numai dacă j_1 şi j_2 sunt relativ mici. În cazul general, se apelează la teoria grupurilor, în cadrul căreia se găseşte expresia generală a acestor coeficienţi.

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

6.9 Sistemele $K^0 - \bar{K}^0$ şi $B^0 - \bar{B}^0$. Violarea simetriei CP

Fie $\mathcal{H}$ spaţiul bidimensional al stărilor subîntins de baza ortonormală $\{|i\rangle\} = \{|1\rangle, |2\rangle\}$, adică, în reprezentare matriceală,

$$|1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{6.142}$$

Un vector ket, $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$, cu componentele componentele ψ_i $(i = 1, 2)$, se scrie ca o combinaţie liniară de vectorii bazei sub forma

$$(\psi) = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix} = \psi_1 \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + \psi_2 \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{6.143}$$

Pentru început, să considerăm cazul simplu al unui sistem descris de hamiltonianul exprimat prin matricea autoadjunctă reală

$$(H) = \begin{pmatrix} H_0 & H_{12} \\ H_{21} & H_0 \end{pmatrix}, \text{ cu } H_{12} = H_{21}^* = \chi. \tag{6.144}$$

Problema diagonalizării acestei matrice se reduce la aceea a găsirii matricei unitare, U, care, printr-o transformare unitară, (2.172), să aducă pe (H) la forma diagonală (H'). O astfel de matrice este de forma

$$(U) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}, \tag{6.145}$$

iar hamiltonianul transformat,

$$\begin{aligned}(H') &= \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi \\ \sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} H_0 & \chi \\ \chi & H_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi \\ -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} H_0 - \chi\sin 2\varphi & \chi\cos 2\varphi \\ \chi\cos 2\varphi & H_0 + \chi\sin 2\varphi \end{pmatrix},\end{aligned} \tag{6.146}$$

este diagonal dacă $\cos 2\varphi = 0$. Găsim astfel două valori posibile ale lui φ, şi anume

$$\varphi_1 = +\frac{\pi}{4}, \quad \varphi_2 = -\frac{\pi}{4}, \tag{6.147}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

cărora le corespund matricele unitare

$$(U)_1 = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \tag{6.148}$$

şi, respectiv,

$$(U)_2 = \frac{\sqrt{2}}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}. \tag{6.149}$$

Acestea conduc la matricele diagonale, echivalente în sensul ordonării valorilor proprii,

$$(H')_1 = \begin{pmatrix} H_0 - \chi & 0 \\ 0 & H_0 + \chi \end{pmatrix} \tag{6.150}$$

şi, respectiv,

$$(H')_2 = \begin{pmatrix} H_0 + \chi & 0 \\ 0 & H_0 - \chi \end{pmatrix}. \tag{6.151}$$

Aplicând relaţia (2.167), pentru $\varphi = \pi/4$, obţinem expresia transformată a vectorului ket (6.143),

$$(\psi') = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} \psi_1 - \psi_2 \\ \psi_1 + \psi_2 \end{pmatrix}, \tag{6.152}$$

şi impunem condiţia ca acesta să fie vector propriu al lui (H'), adică să satisfacă ecuaţia de vectori şi valori proprii

$$(H')(\psi') = \lambda(\psi'). \tag{6.153}$$

Pentru $\lambda_1 = H_0 - \chi$, rezultă $\psi_2 = -\psi_1$ şi astfel, primul vector propriu "ordonat" al lui (H) este

$$(\psi)_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \tag{6.154}$$

şi, în mod analog, rezultă $(\psi)_2$.

Deoarece (H') este diagonal, cei doi vectori proprii normaţi ai lui $\hat{H}'$ pot fi aleşi chiar vectorii bazei ortonormale canonice din $\mathcal{H}$, adică $|1\rangle$ şi $|2\rangle$, şi astfel,

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

în raport cu aceştia, vectorii proprii, $|\psi_1\rangle$ şi $|\psi_2\rangle$, ai operatorului (H), vor fi daţi de relaţiile:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle - |2\rangle\right), \\ |\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\rangle + |2\rangle\right). \end{aligned} \tag{6.155}$$

Se observă că aceşti doi vectori proprii sunt de simetrie univoc definită în sensul că, la permutarea stărilor $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$, primul vector devine $-|\psi_1\rangle$, iar al doilea rămâne neschimbat. Cu alte cuvinte, cele două stări proprii $|1\rangle$ şi $|2\rangle$, ale lui $\hat{H}'$, intervin cu *pondere egală* în stările proprii ale lui $\hat{H}$, determinând *antisimetria* stării $|\psi_1\rangle$ şi *simetria* stării $|\psi_2\rangle$.

Să trecem acum la un caz mai general, cu profunde semnificaţii fizice în ceea ce priveşte legătura dintre hermiticitatea operatorilor asociaţi observabilelor şi univocitatea parităţii funcţiilor proprii ale acestora, şi anume cel reprezentat de un hamiltonian de tipul (6.144), dar, în care, $H_{12} \neq H_{21}$ se află în relaţia

$$e^{i\xi} = \sqrt{\frac{H_{21}}{H_{12}}}, \quad \text{cu} \quad \left|e^{i\xi}\right| \neq 1, \quad \xi \in \mathbf{C}. \tag{6.156}$$

Fără a restrânge generalitatea, putem defini

$$e^{i\xi} = \frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon}, \tag{6.157}$$

unde factorul ε se exprimă în funcţie de elementele matricei (H) ca fiind

$$\varepsilon = \frac{\sqrt{H_{12}} - \sqrt{H_{21}}}{\sqrt{H_{12}} + \sqrt{H_{21}}}. \tag{6.158}$$

Pentru diagonalizarea matricei (H), vom alege o matrice (S) de forma

$$(S) = \frac{1}{\sqrt{2}\,x}\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -e^{i\xi} & e^{i\xi} \end{pmatrix} \tag{6.159}$$

şi avem relaţia

$$\begin{aligned} (H') &= (S)^{\dagger}(H)(S) = \\ &= \frac{1}{2x^2}\begin{pmatrix} 2H_0 - H_{21}\,e^{-i\xi} - H_{12}\,e^{i\xi} & -H_{21}\,e^{-i\xi} + H_{12}\,e^{i\xi} \\ H_{21}\,e^{-i\xi} - H_{12}\,e^{i\xi} & 2H_0 + H_{21}\,e^{-i\xi} + H_{12}\,e^{i\xi} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{6.160}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

adică, ţinând cont de (6.156), am obţinut matricea diagonală

$$(H') = \frac{1}{x^2}\begin{pmatrix} H_0 - \sqrt{H_{12}H_{21}} & 0 \\ 0 & H_0 + \sqrt{H_{12}H_{21}} \end{pmatrix}. \tag{6.161}$$

Urmând aceeaşi cale ca în cazul hamiltonianului (6.144), vom obţine pentru vectorii proprii $(\psi)_1$ şi $(\psi)_2$, ai operatorului (H), în ipoteza (6.156), următoarele expresii:

$$\begin{aligned} (\psi)_1 &= (S)\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}\,x}\begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\xi} \end{pmatrix}, \\ (\psi)_2 &= (S)\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}\,x}\begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\xi} \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{6.162}$$

unde x se determină din condiţia de normare a celor doi vectori, adică

$$x = \sqrt{\frac{1+|\varepsilon|^2}{(1+\varepsilon)(1+\varepsilon^*)}}. \tag{6.163}$$

În concluzie, vectorii (6.162) pot fi scrişi, în raport cu baza canonică (6.142), sub forma

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2(1+|\varepsilon|^2)}}\sqrt{\frac{1+\varepsilon^*}{1+\varepsilon}}\,[(1+\varepsilon)|1\rangle - (1-\varepsilon)|2\rangle], \\ |\psi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2(1+|\varepsilon|^2)}}\sqrt{\frac{1+\varepsilon^*}{1+\varepsilon}}\,[(1+\varepsilon)|1\rangle + (1-\varepsilon)|2\rangle], \end{aligned} \tag{6.164}$$

care evidenţiază următoarele aspecte neobişnuite:

- Existenţa elementelor nediagonale H_{12} şi H_{21}, în relaţia (6.156), conduce la amestecul stărilor $|1\rangle$ şi $|2\rangle$.
- Cele două stări proprii ale lui $\hat{H}'$, $|1\rangle$ şi $|2\rangle$, intervin cu ponderi inegale în stările proprii (6.164) ale lui $\hat{H}$, violând simetria definită anterior, în sensul că permutările $|1\rangle \leftrightarrow |2\rangle$ conduc la obţinerea unor stări noi.
- Stările $|\psi_1\rangle$ şi $|\psi_2\rangle$ nu sunt ortogonale, deoarece

$$\langle\psi_1|\psi_2\rangle = \frac{2\,\mathrm{Re}(\varepsilon)}{1+|\varepsilon|^2} \neq 0. \tag{6.165}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Exemplul prezentat ne oferă un model simplu pentru jusificarea violării simetriei combinate CP, pusă în evidenţă experimental, în 1964, pentru prima oară la sistemul $K^0 - \bar{K}^0$ şi, apoi, la $B^0 - \bar{B}^0$.

Înainte de a trece la analiza succintă a acestor sisteme, să prezentăm, pe scurt, operatorii asociaţi simetriei fundamentale CPT. Astfel, conjugarea de sarcină, paritatea şi inversiunea temporală, obţinute prin acţiunea operatorilor C, P, T, au fost considerate, mult timp, ca simetrii independente ale naturii. Deoarece, în 1957, experimentul lui Wu *et al.* avea să confirme prezicerea lui Lee şi Yang (1956) asupra violării parităţii în interacţiunile slabe, s-a impus sistemelor cuantice ca acestea să conserve simetriile CP şi T. După numai câţiva ani, în 1964, Christenson *et al.* au pus în evidenţă violarea simetriei CP pentru sistemul $K^0 - \bar{K}^0$. În 1977 a fost descoperit experimetal quark-ul *bottom*, ce intră în componenţa mezonilor B. Datorită timpului său de viaţă *lung* ($\tau_B = 1,2\ ps$) comparabil cu al celorlalte quark-uri, el a permis efectuarea experimentală a numeroase teste pentru Modelul Standard şi s-a dovedit a fi o sursă valoroasă de informaţii privind simetriile din natură, principalele tipuri de interacţiuni şi structura constituienţilor materiei. Recent, experimente privind dezintegrarea mezonilor B, efectuate la SLAC (BaBar) şi KEK (Belle), au pus în evidenţă violarea simetriei combinate CP şi pentru sistemul $B^0 - \bar{B}^0$. Putem afirma deci că, după 40 de ani, problema violării simetriei CP rămâne deschisă, o rezolvare a ei furnizând date importante pentru înţelegerea principalelor tipuri de interacţiuni şi a legăturilor dintre ele. Mai mult, problema are profunde implicaţii cosmologice, ea putând să furnizeze o posibilă explicaţie a evoluţiei Universului, după Big-Bang, într-o lume dominată de materie.

În condiţiile violării simetriilor P şi CP, esenţial, pentru orice teorie cuantică, este respectarea Teoremei CPT care se enunţă astfel:

Teorema 1 *Pentru orice sistem cuantic, Lorentz invariant şi care posedă proprietatea de microcauzalitate, CPT se conservă în toate interacţiunile.*

În cele ce urmează, vom prezenta operatorii C, P şi T, insistând asupra proprietăţilor acestora.

- *Conjugarea de sarcină. Operatorul C*
  Prin acţiuna operatorului C, o particulă, reprezentată prin funcţia de undă $|\psi\rangle$, trece în antiparticula sa, $|\bar{\psi}\rangle$ şi invers, adică

$$C|\psi\rangle = |\bar{\psi}\rangle \tag{6.166}$$

BCU IAŞI CENTRUL UNIVERSITAR LIBRARY

şi

$$C|\bar{\psi}\rangle = |\psi\rangle\,. \tag{6.167}$$

Aplicând de două ori operatorul C, rezultă, din $C^2 = \hat{1}$, că valorile proprii ale lui C sunt: $\eta_A = \pm 1$. Mărimea η_A se numeşte *paritate de sarcină* şi ea se conservă în interacţiunile electromagnetice şi tari, dar nu se conservă în interacţiunile slabe.

- *Paritatea. Operatorul P*

Paritatea se defineşte ca o reflexie spaţială, adică este operaţia prin care se inversează direcţia axelor de coordonate:

$$P : \vec{r} \to -\vec{r}\,. \tag{6.168}$$

Printr-un *vector*, înţelegem mărimea care se comportă ca şi $\vec{r}$, sub acţiunea operatorului P, adică

$$P : \vec{v} \to -\vec{v}\,. \tag{6.169}$$

Produsul $\vec{v} \times \vec{w}$, păstrându-şi semnul la acţiunea lui P, este un *pseudovector* (de exemplu, momentul cinetic orbital), iar relaţiile:

$$P : \vec{v} \cdot \vec{w} \to \vec{v} \cdot \vec{w} \tag{6.170}$$

şi

$$P : \vec{v} \cdot (\vec{w} \times \vec{u}) \to -\vec{v}(\vec{w} \times \vec{u}) \tag{6.171}$$

definesc un *scalar* şi, respectiv, un *pseudoscalar*. Pentru un microsistem, cu spaţiul liniar abstract al stărilor sale cuantice $\mathcal{H}$, acţiunea operatorului P asupra bazei $\{|\vec{r}\rangle\}$ se defineşte prin relaţia

$$P|\vec{r}\rangle = |-\vec{r}\rangle\,, \tag{6.172}$$

iar asupra bazei $\{|\vec{p}\rangle\}$, prin relaţia

$$P|\vec{p}\rangle = |-\vec{p}\rangle\,. \tag{6.173}$$

Utilizând teoria spectrului continuu, prezentată în paragraful 2.6, se poate demonstra că operatorul P este unitar şi autoadjunct [26]. De asemenea, după cum am văzut în paragraful 6.2, valorile proprii ale lui P sunt ± 1, vectorul propriu aparţinând valorii proprii $\eta = +1$ este par, iar cel

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

aparţinând lui $\eta = -1$ este impar. Dacă un operator, $\hat{A}$, comută (anticomută) cu P, atunci el este par (impar). Evident, operatorul P, comutând cu el însuşi, este par. Se poate demonstra că, deşi operatorii coordonată şi impuls sunt impari, hamiltonianul $H = p^2/(2m) + kr^2/2$ este un operator par, adică $[H, P] = 0$ [26]. Operatorul paritate ne permite definirea proiectorilor [26]

$$P_{\pm} = \frac{1}{2}(\hat{1} \pm P), \tag{6.174}$$

astfel încât orice vector $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ să poată fi scris ca o sumă de doi vectori proprii ai lui P sub forma

$$|\psi\rangle = (P_+ + P_-)\,|\psi\rangle = |\psi_+\rangle + |\psi_-\rangle\,, \tag{6.175}$$

unde $|\psi_+\rangle \in \mathcal{H}_+$ şi $|\psi_-\rangle \in \mathcal{H}_-$, subspaţiile $\mathcal{H}_+$ şi $\mathcal{H}_-$ fiind ortogonale şi suplementare. Deci, având un set complet de vectori proprii în spaţiul pe care acţonează, P este o observbilă.

O *particulă pseudoscalară*, cu funcţia de undă $|\psi\rangle$, se transformă după legea

$$P|\psi\rangle = -|\psi\rangle\,, \tag{6.176}$$

iar antiparticula sa, având funcţia de undă $|\bar{\psi}\rangle$, după legea

$$P|\bar{\psi}\rangle = -|\bar{\psi}\rangle\,. \tag{6.177}$$

- *Inversiunea temporală. Operatorul T*

Operatorul de inversiune temporală are rolul de a inversa direcţia axei timpului

$$T : t \to -t\,, \tag{6.178}$$

adică de a inversa, între ele, stările iniţială şi finală. Astfel, acţiunea operatorului T asupra unui vector $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ este

$$T|\psi\rangle = \langle\psi|\,, \tag{6.179}$$

iar asupra lui $\langle\psi|$ este

$$\langle\psi|T = |\psi\rangle\,. \tag{6.180}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

În sfârşit, utilizând relaţiile (6.166, 167) şi (6.176, 177), putem scrie acţiunea combinată a operatorilor C şi P asupra stărilor $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ ca fiind:

$$CP|\psi\rangle = -|\bar{\psi}\rangle \tag{6.181}$$

şi, respectiv,

$$CP|\bar{\psi}\rangle = -|\psi\rangle\,. \tag{6.182}$$

Dacă stările $|\psi\rangle$ şi $\bar{\psi}\rangle$ sunt legate prin intermediul unui hamiltonian de interacţiune slabă, adică $\langle\bar{\psi}|H|\psi\rangle$, şi (H) conţine elemente nediagonale în relaţia (6.156), atunci, după cum am arătat, se obţine un amestec inegal al stărilor $|\psi\rangle$ şi $|\bar{\psi}\rangle$. În plus, se poate pune în evidenţă o violare a simetriei CP, caracterizată de parametrul ε dependent, după cum vom vedea, de partea imaginară a lui H_{12} şi de diferenţa maselor celor două stări fizice $|\psi_1\rangle$ şi $|\psi_2\rangle$.

Să trecem acum la sistemul $B^0 - \bar{B}^0$, precizând că tratarea sistemului $K^0 - \bar{K}^0$ se face într-un mod cu totul analog. Astfel, în baza celor discutate în acest paragraf, acţiunea operatorilor P, C şi CP asupra funcţiilor de undă ale mezonilor pseudoscalari B^0 şi $\bar{B}^0$ este:

$$\begin{aligned}
P|B^0\rangle &= -|B^0\rangle \quad ; \quad P|\bar{B}^0\rangle = -|\bar{B}^0\rangle \\
C|B^0\rangle &= |\bar{B}^0\rangle \quad ; \quad C|\bar{B}^0\rangle = |B^0\rangle \\
T|B^0\rangle &= \langle B^0| \quad ; \quad T|\bar{B}^0\rangle = \langle\bar{B}^0| \\
CP|B^0\rangle &= -|\bar{B}^0\rangle \quad ; \quad CP|\bar{B}^0\rangle = -|B^0\rangle\,.
\end{aligned} \tag{6.183}$$

Hamiltonianul efectiv, corespunzător sistemului analizat, poate fi calculat prin metode perturbative şi are expresia

$$H = H_0 + H_{wk}\,, \tag{6.184}$$

unde H_0 este termenul dominant şi este diagonal, iar H_{wk} (weak), reprezintă perturbaţia datorită interacţiunilor electroslabe. Astfel, matricea asociată operatorului $\hat{H}$ are elementele

$$\begin{aligned}
H_{ij} &= \langle i|H|j\rangle = \langle i|\,(H_0 + H_{wk})\,|j\rangle = \\
&= m_B\,\delta_{ij} + \langle i|H_{wk}|j\rangle + \sum_n \frac{\langle i|H_{wk}|n\rangle\langle nH_{wk}|j\rangle}{m_B - E_n}
\end{aligned} \tag{6.185}$$

ce pot fi scrise ca o sumă de doi termeni:

$$H_{ij} = M_{ij} - i\frac{\Gamma_{ij}}{2}\,, \tag{6.186}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

unde M_{ij} şi Γ_{ij} sunt hermitice, adică $M_{ij} = M_{ji}^*$ şi $\Gamma_{ij} = \Gamma_{ji}^*$. Se poate demonstra că invarianţa CPT implică următoarele relaţii:

$$M_{11} = M_{22}\,, \quad \Gamma_{11} = \Gamma_{22}\,, \tag{6.187}$$

adică $H_{11} = H_{22} \equiv H$, iar invarianţa CP impune $M_{12} = M_{21}$ şi $\Gamma_{12} = \Gamma_{21}$. Astfel, pentru vectorul cu două componente

$$\psi = \begin{pmatrix} B^0 \\ \bar{B}^0 \end{pmatrix}, \tag{6.188}$$

problema de vectori şi valori proprii,

$$\hat{H}\psi = E\psi, \tag{6.189}$$

are soluţia

$$E_{1,2} = H \pm \sqrt{H_{12}\,H_{21}} \tag{6.190}$$

(vezi (6.150)).

În cazul existenţei unei diferenţe de fază între H_{12} şi H_{21}, introducem numărul complex ξ, prin relaţia (6.157), adică

$$e^{i\xi} = \frac{1-\varepsilon}{1+\varepsilon} = \frac{q}{p}\,, \tag{6.191}$$

unde $e^{i\xi} = \sqrt{H_{21}/H_{12}}$. Stările fizice obţinute, $|B_L\rangle$ şi $|B_S\rangle$, cu indicii L şi S de la *long* şi *short*, vor fi de forma (6.164), adică

$$\begin{aligned} |B_L\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2(1+|\varepsilon|^2)}}\left[(1+\varepsilon)|B^0\rangle + (1-\varepsilon)|\bar{B}^0\rangle\right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{|p|^2+|q|^2}}\left[p|B^0\rangle + q|\bar{B}^0\rangle\right], \\ |B_S\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2(1+|\varepsilon|^2)}}\left[(1+\varepsilon)|B^0\rangle - (1-\varepsilon)|\bar{B}^0\rangle\right] = \\ &= \frac{1}{\sqrt{|p|^2+|q|^2}}\left[p|B^0\rangle - q|\bar{B}^0\rangle\right], \end{aligned} \tag{6.192}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi, evident, nu sunt ortogonale. Parametrul ε, ce caracterizează violarea simetriei CP, se raportează la elementul matriceal M_{12} prin relaţia:

$$\begin{aligned}\varepsilon &= \frac{1-e^{i\xi}}{1+e^{i\xi}} = \frac{\sqrt{H_{12}}-\sqrt{H_{21}}}{\sqrt{H_{12}}+\sqrt{H_{21}}} = \frac{H_{12}-H_{21}}{\left(\sqrt{H_{12}}+\sqrt{H_{21}}\right)^2} \approx \\ &\approx \frac{H_{12}-H_{21}}{4\sqrt{H_{12}\,H_{21}}} = \frac{M_{12}-\frac{i}{2}\,\Gamma_{12}-\left(M_{12}^*-\frac{i}{2}\,\Gamma_{12}^*\right)}{4\sqrt{H_{12}\,H_{21}}} = \\ &\approx \frac{i\,\mathrm{Im}\,M_{12}}{\Delta M-\frac{i}{2}\,\Delta\Gamma}\,, \end{aligned} \tag{6.193}$$

unde s-au introdus notaţiile

$$\Delta M = M_L - M_S\,,\ \ \Delta\Gamma = \Gamma_L - \Gamma_S\,, \tag{6.194}$$

astfel încât

$$2\sqrt{H_{12}\,H_{21}} = 2\sqrt{\left(M_{12}-\frac{i}{2}\,\Gamma_{12}\right)\left(M_{12}^*-\frac{i}{2}\,\Gamma_{12}^*\right)} \equiv \Delta M - \frac{i}{2}\Delta\Gamma \tag{6.195}$$

şi s-a lucrat în aproximaţia $|\Gamma_{12}| \ll |M_{12}|$. În acest caz, din (6.195), se observă că diferenţa maselor, ΔM_B, ce caracterizează amestecul stărilor B şi $\bar{B}$, este dată de elementul matriceal M_{12}, deoarece

$$\Delta M_B \approx 2|M_{12}|\,. \tag{6.196}$$

Acest element se calculează, în cadrul Modelului Standard, pentru aşa-numitele diagrame de tip *box*, specifice sistemul $B^0-\bar{B}^0$, ce includ schimbul de quark-uri grele (quark-ul *top* aduce contribuţia dominantă) şi bozoni vectoriali $W^\pm$, în stări intermediare. În plus, elementele M_{12} ne dau informaţii importante şi asupra violării simetriei CP deoarece parametrul ε este practic proporţional cu raportul dintre partea imaginară a lui M_{12} şi diferenţa maselor ΔM, prin relaţia (6.193), adică

$$|\varepsilon| \approx \frac{\mathrm{Im}\,M_{12}}{\Delta M} = const.\,\sin\delta\,, \tag{6.197}$$

unde defazajul δ este caraceristic violării simetriei CP.

BCU "LUCIAN BLAGA" UNIVERSITY LIBRARY

Partea III

MECANICĂ CUANTICĂ RELATIVISTĂ

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Cuprins

III MECANICĂ CUANTICĂ RELATIVISTĂ 245

7 Câmpul scalar 249
7.1 Definiţia câmpului scalar 249
7.2 Ecuaţia Klein–Gordon 252
7.3 Formalismul lagrangeian 262

8 Câmpul spinorial 267
8.1 Ecuaţia lui Dirac 267
8.2 Consecinţe ale ecuaţiei Dirac 270
8.2.1 Momentul magnetic propriu al electronului 270
8.2.2 Spinul electronului 272
8.2.3 Aproximaţia nerelativistă 273
8.3 Transformările Foldy–Wouthuysen 275
8.3.1 Un caz particular simplu 278
8.3.2 Particula liberă 280
8.3.3 Cazul general 282
8.4 Formularea Lorentz-covariantă a ecuaţiei lui Dirac 285
8.5 Formalismul lagrangeian 292
8.6 Sistemul fundamental de soluţii 293
8.7 Spre a doua cuantificare 311

BCU IAŞI - CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Capitolul 7

Câmpul scalar

7.1 Definiţia câmpului scalar

În perioada de început a cercetărilor de cuantică relativistă, vârsta teoriilor ce urmau să fuzioneze era cam aceasta: Mecanica Cuantică – unu, doi ani, Teoria Relativităţii Restrânse – puţin peste 20 de ani, Relativitatea Generală, deşi avea mai mult de un deceniu, nu fusese explorată, şi nici exploatată, aproape deloc. Prin urmare, orice fel de probleme legate de o altă structură a spaţiu-timpului decât cea minkowskiană au fost eliminate din start. S-a trecut, deci, doar la unificarea mecanicii cuantice nerelativiste, bazate pe ecuaţia Schrödinger, cu Relativitatea Specială, având ca suport geometric spaţiul Minkowski. Din cauza marii diferenţe de vârstă dintre cele două teorii, fuziunea a fost, în fazele ei iniţiale, puternic asimetrică. Principiile relativiste dominau în faţa celor cuantice conducând, chiar de la cel mai simplu nivel, acela al utilizării câmpului scalar pentru descrierea stărilor cuantice ale unei microparticule relativiste, la probleme foarte serioase, greu de rezolvat, sau măcar de interpretat, în cadrul, pe atunci, prea strâmt, al tinerei Mecanici Cuantice. Dar, exact soluţionarea acestor probleme (stări de energie negativă, densităţi negative de probabilitate, stări de normă negativă, tratarea sistemelor de microparticule relativiste etc.) a impulsionat dezvoltarea Teoriei Cuantice a Câmpurilor ca o veritabilă unificare (în câmpuri gravitaţionale slabe, liniarizabile) a Mecanicii Cuantice cu Relativitatea einsteiniană.

Lăsând de o parte particulele de spin 3/2 şi 2 , ele constituind subiectul unor studii mai avansate de teorii de câmp, în primele două capitole ale acestei părţi,

BABEŞ-BOLYAI UNIVERSITY LIBRARY

ne vom concentra asupra câmpurilor scalare ($s = 0$) şi spinoriale ($s = 1/2$). Dintre câmpurile vectoriale ($s = 1$), fotonul şi bozonii vectoriali intermediari masivi, $W^{\pm}$ şi Z^0, vor fi prezentaţi în Partea a IV-a, ca şi câmpuri gauge ce mediază interacţiunile electromagnetice şi slabe.

Deşi, dintre toate câmpurile asociate particulelor elementare, scalarul este cel mai simplu, modalitatea concretă de definire a acestuia nu este lipsită de interes, ea stând la baza relaţiilor de definiţie a celorlalte câmpuri fizice, de "varianţă" mai înaltă. Să începem cu un exemplu care demonstrează netrivialitatea problemei. Fie $\mathbf{R}$ dreapta reală şi ϕ o aplicaţie definită pe ea cu valori în $\mathbf{R}$ (privit ca un corp algebric). Simplist, se spune adesea că ϕ este un câmp scalar dacă este invariant. În sensul ei strict, această afirmaţie este cel puţin incompletă, apărând imediat întrebarea "invariant la ce"? Să presupunem că eliminăm această ambiguitate, precizând că avem în vedere invarianţa la translaţii infinitezimale, adică la transformări de forma $x \to x' = x + \varepsilon$, cu ε o constantă reală şi $|\varepsilon|$ suficient de mic, astfel încât, pentru orice număr natural $n \geq 2$, termenii în ε^n să fie neglijabili. Acum se pune a doua întrebare, care este, de fapt, cea mai importantă: cum definim invarianţa ? Dacă vom confunda câmpul (ca aplicaţie) cu scalarul şi vom cere ca $\phi(x')$ să fie egal cu $\phi(x)$, obţinem

$$\phi(x') = \phi(x+\varepsilon) = \phi(x) + \varepsilon \frac{\partial \phi}{\partial x} = \phi(x) ,$$

adică

$$\frac{\partial \phi}{\partial x} = 0 , \quad (\forall)\, x \in \mathbf{R} ,$$

deci

$$\phi(x) = \phi_0 ,$$

constant peste tot în $\mathbf{R}$. Prin urmare, a defini un câmp scalar printr-o asemenea relaţie de invarianţă înseamnă a elimina, din start, cazul fizic cel mai interesant, reprezentând în mod general însăşi noţiunea de câmp, anume cel al aplicaţiilor dependente de punct. Deci, condiţia $\phi(x') = \phi(x), (\forall)x \in \mathbf{R}$, este prea tare, ea restrângând clasa câmpurilor scalare la clasa câmpurilor absolut invariante sau, pe scurt, a invarianţilor absoluţi. Deşi, la prima vedere, această sintagmă poate părea un pleonasm, atributul "absolut" îşi are rolul său neredundant, specificând faptul că numai aplicaţiile constante $\phi : \mathbf{R} \to \phi_0 \in \mathbf{R}$ îndeplinesc condiţia de invarianţă $\phi(x') = \phi(x)$, peste tot în $\mathbf{R}$, oricare ar fi transformările

nesingulare

$$h_\varepsilon : \mathbf{R} \to \mathbf{R} \text{ prin } x' = h_\varepsilon(x) = x'(x,\varepsilon),\ h_0(x) = x'(x,0) = x\,,$$

formând un grup Lie unidimensional (în cazul de faţă). Desigur, această proprietate rămâne valabilă şi pe varietăţile de dimensiune mai mare. Acolo, însă, pot apărea şi câmpuri cu valori într-un corp de scalari care, deşi respectă invarianţa tare $\phi(x') = \phi(x)$ faţă de un grup de transformări $x' = x'(x,\varepsilon)$, nu sunt constante pe M (varietatea respectivă). Acestea poartă tot numele de "câmpuri absolut invariante", dar cu specificarea "faţă de grupul G al transformărilor considerate", în sensul că forma funcţională a aplicaţiei ϕ este invariantă la acţiunea grupului.

Pentru a defini clasa câmpurilor scalare, păstrând un grad de generalitate rezonabil, vom insista asupra elementului logic cel mai sensibil. Dacă avem în vedere o transformare de coordonate $h : (x) \in \mathbf{R}^n \to (x') \in \mathbf{R}^n$, unde $\mathbf{R}^n$ este "spaţiul model" al unei varietăţi M_n (de dimensiune n), atunci rezultă, pentru invarianţa absolută, condiţia funcţională

$$\phi \circ h = \phi \Leftrightarrow \phi = \phi \circ h^{-1}\,,$$

care este îndeplinită numai de aplicaţiile constante $\phi = \phi_0$, când

$$\phi \circ h = \phi_0 \circ h = \phi_0$$

şi de cele invariant funcţionale, când

$$\delta_h(\phi \circ h) = \frac{\delta\phi}{\delta h}\delta h = 0 \Leftrightarrow \frac{\delta\phi}{\delta h} = 0\,.$$

De altfel, acest aspect rezultă şi din înlocuirea lui $\phi = \phi \circ h^{-1}$ în ecuaţia $\phi \circ h = \phi$, obţinând astfel

$$\phi = \phi\,,$$

în sens funcţional. Relaxarea condiţiei de invarianţă (absolută) se face simplu, observând că, dacă $\phi(x)$ este valoarea aplicaţiei ϕ în punctul x şi "venim" spre acesta din x' prin inversa, h^{-1}, a transformării (diferenţiabile) h, atunci avem

$$\phi(x) = \phi \circ h^{-1}(x') = \phi'(x')$$

şi invers, respectiv

$$\phi'(x') = \phi' \circ h(x) = \phi(x)\,,$$

BCU IAŞI / CENTRALA UNIVERSITARĂ / LIBRARY

când "venim" în x' din x direct prin aplicaţia h. Altfel spus, obţinem "legea de invarianţă a câmpurilor scalare"

$$\phi'(x') = \phi(x)\,,$$

sau funcţional

$$\phi' = \phi \circ h^{-1} \Leftrightarrow \phi = \phi' \circ h\,,$$

care este mai generală decât prima, în următorul sens: "valoarea $\phi(x)$ din corpul algebric $\mathbf{K}$ a aplicaţiei ϕ în x rămâne aceeaşi sub acţiunea transformării $h : x \to x'$, dar forma funcţională a câmpului în x', adică ϕ', se transformă prin h^{-1}, după regula simplă a compunerii de funcţii".

Definiţie. Un câmp ϕ, pe spaţiul model al unei varietăţi M, se numeşte *scalar*, dacă la o schimbare h de coordonate, el se transformă prin compunere (de funcţii) cu h^{-1}.

7.2 Ecuaţia Klein–Gordon

Fie ecuaţia Schrödinger de evoluţie,

$$\hat{H}\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}\,, \tag{7.1}$$

unde vom utiliza hamiltonianul unei particule relativiste libere,

$$H = \sqrt{c^2|\vec{p}|^2 + m^2c^4}\,. \tag{7.2}$$

Obţinem astfel varianta relativistă a ecuaţiei Schrödinger, adică

$$\sqrt{c^2\,\hat{\vec{p}}\cdot\hat{\vec{p}} + m^2c^4}\,\Psi = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi\,, \tag{7.3}$$

unde $\Psi(\vec{r},t) = \Psi(x)$ este un câmp scalar. Aici apare întrebarea: *cum se poate extrage rădăcina pătrată dintr-un operator precum* $-\hbar^2\Delta + m^2c^2$ *?* Răspunsul corect a fost dat de Dirac, în 1928, care, însă, a renunţat la caracterul scalar al câmpului Ψ, în favoarea unuia cu mult mai special, şi anume, bispinorial [15]. Cu studiul unor astfel de câmpuri, descriind particule relativiste de spin 1/2, ne vom ocupa în capitolul următor. Înaintea lui Dirac, Gordon a observat că putem *scăpa* de radical şi păstra natura scalară a câmpului dacă, formal,

RUTGERS / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

ridicăm la pătrat ambii membri ai ecuaţiei, lăsând la o parte, iniţial, funcţia Ψ şi adăugând-o pe urmă, adică

$$\sqrt{c^2\,\hat{\vec{p}}\cdot\hat{\vec{p}}+m^2c^4}=i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\;\rightarrow\;\left(\Delta-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2}\right)\Psi-\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\Psi=0\,,$$

de unde se obţine, în *unităţi naturale* ($\hbar=1$, $c=1$), ecuaţia

$$\left(\Box-m^2\right)\Psi=0\,, \tag{7.4}$$

care îi poartă numele. O motivaţie mai serioasă pentru acest artificiu a fost următoarea. Din moment ce energia nu este un scalar relativist, de ce să aplicăm principiul corespondenţei ecuaţiei $H=E$, în sensul $\hat{H}\Psi=\hat{E}\Psi$, şi să nu îl aplicăm ecuaţiei obţinute din $H^2=E^2$, adică $E^2-c^2|\vec{p}\,|^2=m^2c^4$, care este manifest Lorentz-invariantă. Rezultă imediat

$$\left(\hat{E}^2-c^2\,\hat{\vec{p}}\cdot\hat{\vec{p}}\right)\Psi=m^2c^4\Psi\,, \tag{7.5}$$

adică exact *ecuaţia Gordon*. Când a fost anunţată comunităţii ştiinţifice internaţionale, bucuria a fost imensă, dar, în numai câteva luni, au început necazurile... Dacă lucrăm cu ecuaţia $\hat{H}\Psi=\hat{E}\Psi$, căreia îi mai aplicăm o dată, din stânga, în ambii membri, operatorul $\hat{H}$, obţinem ecuaţia $\hat{H}^2\Psi=\hat{H}\hat{E}\Psi$. Astfel, în stânga am "scăpat" de radical, dar în dreapta, pentru a forma operatorul $\hat{E}^2$, trebuie ca $\hat{H}$ să comute cu $\hat{E}$ fiindcă, atunci,

$$\hat{H}^2\Psi=\hat{H}\hat{E}\Psi=\hat{E}\hat{H}\Psi=\hat{E}^2\Psi\;\Rightarrow\;\left[-\Delta+\left(\frac{mc}{\hbar}\right)^2\right]\Psi=-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\Psi}{\partial t^2}\,.$$

Dacă, pentru particula liberă, comutarea celor doi operatori nu ridică nici o problemă, hamiltonianul fiind independent de timp, în cazul prezenţei interacţiunilor însă, care din principiu sunt (sau pot fi) variabile în timp, avem $[\hat{H}\,,\hat{E}]\neq 0$, astfel încât trecerea de la $\hat{H}\Psi=\hat{E}\Psi$ la $\hat{H}^2\Psi=\hat{E}^2\Psi$ nu mai are nici o acoperire. Fizic, pentru a sesiza rapid gravitatea problemei $[\hat{H}\,,\hat{E}]\neq 0$, este suficient să ne gândim la modelarea interacţiunii unei particule relativiste de sarcină q şi hamiltonian [33]

$$H=c\sqrt{(\vec{P}-q\vec{A})^2+m^2c^2}\,, \tag{7.6}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

cu câmpul electric $\vec{\mathcal{E}} = -\frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$ al unei unde electromagnetice. Aici, $\vec{P}$ este *impulsul canonic* al particulei, în câmpul vector-potenţial $\vec{A}$, adică

$$\vec{P} = \vec{p} + q\vec{A},$$

iar $\vec{p}$ este *impulsul mecanic*. Este clar că, în principiu, dacă trecerea de la ecuaţia Schrödinger cu $\hat{H}$ la ecuaţia Gordon cu $\hat{H}^2$ şi E^2 nu mai este justificată, atunci nici rezultatele obţinute prin integrarea ecuaţiei din urmă nu mai prezintă credibilitate, adică, practic, nu am putea analiza interacţiunea cuantică, relativistă, a unei sarcini cu un câmp de radiaţie. La vremea respectivă (1926-1928), susţinătorii ecuaţiei Klein–Gordon (vezi (7.10)), ca ecuaţie de primă cuantificare relativist-invariantă (aşa cum este ecuaţia Schrödinger în cazul nerelativist), au afirmat că problema este, de fapt, una falsă. Totul provine din ideea că ecuaţia în $\hat{H}^2$, $\hat{E}^2$ trebuie obţinută din cea în $\hat{H}$, $\hat{E}$. Dar nici ecuaţia Schrödinger nu a fost demonstrată. Ea a fost, cel mult, justificată, dacă nu, "mai rău", postulată ! Exact la fel putem proceda şi cu ecuaţia Klein–Gordon, postulând-o, sau, cel mult, justificând-o prin aplicarea principiului corespondenţei direct relaţiei $H^2 = E^2$. În cazul particulei relativiste în câmp electromagnetic, justificarea este chiar foarte frumoasă. Astfel, din expresia relativistă a energiei totale a unei particule de sarcină q, în câmpul de potenţial electric V,

$$E = c\sqrt{|\vec{p}|^2 + m^2c^2} + qV\,, \tag{7.7}$$

putem scrie relaţia

$$H = c\sqrt{(\vec{P} - q\vec{A})^2 + m^2c^2} + qV = E\,, \tag{7.8}$$

clasic echivalentă cu

$$c^2\left[(\vec{P} - q\vec{A})^2 + m^2c^2\right] = (E - qV)^2\,. \tag{7.9}$$

Din această relaţie, aplicând principiul corespondenţei şi trecând la unităţi naturale, obţinem *ecuaţia Klein–Gordon*

$$\left[(\nabla - iq\vec{A})^2 - m^2\right]\Psi = \left(\frac{\partial}{\partial t} + iqV\right)^2\Psi\,. \tag{7.10}$$

Nu mai explicităm produsul de operatori din cei doi membri, deoarece observăm un aspect fizico-matematic mult mai interesant care, trei decenii mai târziu (în

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

1954), a stat la baza teoriei *gauge* a câmpurilor *Yang–Mills*. Avem în vedere că $V = -A_4$, iar

$$(\nabla - iq\vec{A})^2 = \delta^{\mu\nu}(\partial_\mu - iqA_\mu)(\partial_\nu - iqA_\nu)$$

şi $t = x^4$, astfel încât

$$\frac{\partial}{\partial t} + iqV = \partial_4 - iqA_4 .$$

Trecând totul în membrul stâng în (7.10), rezultă ecuaţia Klein–Gordon sub forma

$$\left[\delta^{\mu\nu}(\partial_\mu - iqA_\mu)(\partial_\nu - iqA_\nu) - (\partial_4 - iqA_4)^2 - m^2\right]\Psi = 0 , \qquad (7.11)$$

ce se mai poate scrie, deosebit de compact şi extrem de asemănător cu ecuaţia particulei libere,

$$\left[\eta^{ik} D_i D_k - m^2\right]\Psi = 0. \qquad (7.12)$$

Aici, $(\eta^{ik}) = \mathrm{diag}[1, 1, 1, -1]$ şi $D_i = \partial_i - iqA_i$ este un operator care, mai târziu, a fost denumit *derivată* $U(1)$ *gauge-covariantă* şi asupra căreia vom reveni, în Capitolul 9. În consecinţă, înglobarea interacţiunii electromagnetice în cuantica scalarului relativist, pornind de la o relaţie clasică $H^2 = E^2$, nu numai că nu are nici o carenţă formală, dar şi măreşte gradul de interes şi valoarea estetică a ecuaţiei.

Pentru o configuraţie de tipul ionului hidrogenoid, ecuaţia (7.9) se reduce la

$$c^2\left(-\hbar^2\Delta + m^2c^2\right)|\psi\rangle = \left(E + \frac{\lambda}{r}\right)^2 |\psi\rangle , \quad \text{cu } \lambda = \frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0} , \qquad (7.13)$$

de unde rezultă expresia

$$E_{nl} = mc^2\left\{1 + \alpha^2\left[\left(n - l - \frac{1}{2}\right) + \left(l + \frac{1}{2}\right)\sqrt{1 - \frac{\alpha^2}{(l+\frac{1}{2})^2}}\right]^{-2}\right\}^{-1} \qquad (7.14)$$

sau, dezvoltând în serie după puterile constantei structurii fine

$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c},$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

obţinem relaţia

$$E_{nl} \approx mc^2 \left\{ 1 - \frac{Z^2\alpha^2}{2\,n^2} + \frac{Z^4\alpha^4}{2\,n^4} \left(\frac{3}{4} - \frac{n}{l+\frac{1}{2}} \right) \right\}, \tag{7.15}$$

care ne dă o structură fină a spectrului, dar cu toate liniile deplasate faţă de cele experimentale, în cazul atomului de hidrogen.

Din păcate, la nivelul aşa-numitei *formulări uniparticulă* a Mecanicii Cuantice Relativiste, nici această modalitate de justificare a ecuaţiei Klein–Gordon nu este lipsită de probleme, de această dată, fizico-filosofice. Lăsând la o parte întrebarea deosebit de grea (în cadrul descrierii uniparticulă) şi anume "cum compunem câmpurile Ψ ale fiecărei particule, pentru a modela stările cuantice ale sistemului relativist format din acestea?", să ne concentrăm asupra următoarei chestiuni. Din $E^2 = |\vec{p}|^2 + m^2$ rezultă, deopotrivă, două valori disjuncte:

$$E = \pm E_p\,, \quad E_p = \sqrt{|\vec{p}|^2 + m^2}\,, \tag{7.16}$$

pentru energia particulei. Cum interpretăm energia negativă, $-E_p$, a unei particule libere? În teoria relativistă a fermionilor, dată de Dirac, răspunsul a fost extrem de interesant. Pur şi simplu, toate stările de energie negativă sunt complet ocupate de fermioni, în acord cu principiul lui Pauli, astfel încât între acestea nu este posibilă nici o tranziţie, fiind deci, fizic, inobservabile. Pentru amănunte ce apar în acest model de completă ocupare a vidului, numit şi modelul mării Fermi–Dirac, recomandăm tratate dedicate teoriilor cuantice de câmp [13]. Revenind la particulele scalare, acestea sunt bozoni, nu ascultă de principiul de excluziune, deci se pot acumula oricâte, pe orice nivel energetic. Pentru a ieşi, parţial, din impas, în acei ani de început, când Teoria Cuantică a Câmpurilor nu apăruse încă, s-a susţinut că este posibilă, în principiu, existenţa a două universuri gemene, dar de energii contrare, atâta vreme cât, între cele două lumi, nu pot avea loc tranziţii. Pur şi simplu, s-a întâmplat să trăim în "lumea de energie pozitivă". Cum, cel puţin pentru particula liberă, energia (ei) este constantă, înseamnă că, dacă ea a fost "de la început" negativă, va rămâne aşa, neexistând nici o şansă ca acea particulă să apară în universul energiilor pozitive. Problema deosebit de sensibilă cu această explicaţie este aceea a câmpurilor exterioare foarte intense, care pot conferi unei particule de energie $-E_p$ un surplus energetic, superior valorii $E_p + mc^2$, ce o fac să apară în lumea energiilor pozitive. Acest *efect* a primit numele lui *Klein* şi prezintă

interes, chiar şi astăzi, în studiul comportării microparticulelor în câmpuri electromagnetice sau gravitaţionale deosebit de intense. Nu ne propunem acum să lămurim efectul Klein, deoarece complexitatea sa depăşeşte cadrul lucrării de faţă. Am vrut doar să îl semnalăm ca pe o dificultate serioasă în calea *formulării uniparticulă*. Cum o nenorocire nu vine niciodată singură, chiar dacă omitem efectul Klein, spunând că lucrăm în limita energiilor joase (sub $2mc^2$, pentru o particulă dată), apare o altă problemă, mai gravă prin simplitatea ei. De îndată ce acceptăm că o particulă liberă se poate afla în stări de energie negativă, atunci trebuie să acceptăm şi faptul că, în aceste stări, probabilitatea (cuantică) de prezenţă a particulei într-un domeniu spaţial este, de asemenea, negativă. Că aşa stau lucrurile, vom vedea imediat. Din ecuaţia Gordon şi conjugata sa complexă

$$\Box\Psi - m^2\Psi = 0 \ , \ \Box\Psi^* - m^2\Psi^* = 0$$

obţinem, înmulţind-o pe prima cu Ψ^*, pe a doua cu Ψ şi făcând diferenţa,

$$\partial^i\left[\Psi^*\Psi_{,i} - \Psi^*{}_{,i}\,\Psi\right] = 0\,,$$

unde $\partial^i = \eta^{ik}\frac{\partial}{\partial x^k} = \eta^{ik}(\cdot)_{,k}$. Prin urmare, cuadrivectorul

$$s_i = \Psi^*\Psi_{,i} - \Psi^*{}_{,i}\,\Psi$$

este conservativ, având 4-divergenţa nulă. Cum, însă, sub acţiunea conjugării complexe

$$s_i^* = \Psi^*{}_{,i}\,\Psi - \Psi^*\Psi_{,i} = -\,s_i$$

componentele sale se transformă precum numerele pur imaginare, rezultă că mărimea observabilă (deci reală) de acelaşi tip, şi anume *cuadrivectorul curentului de probabilitate*, notat adesea cu j_i, se va obţine din s_i prin înmulţire cu $-\,i$, adică

$$j_i = -\,i\left[\Psi^*\Psi_{,i} - \Psi^*{}_{,i}\,\Psi\right]\,. \tag{7.17}$$

De ce se înmulţeşte cu $-\,i$ şi nu cu i, este o chestiune legată de convenţia de fază $\varphi = \frac{i}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{x} - Et)$ a undei plane asociate particulei de energie pozitivă în signatura $+2$, adică $\eta = \mathrm{diag}[1, 1, 1, -1]$, a spaţiu-timpului. De ce este o densitate a curentului de probabilitate, se vede imediat, aplicând principiul euristic, adică prin compararea componentelor spaţiale j_μ cu 3-vectorul curentului de probabilitate (1.60), din Mecanica Cuantică nerelativistă. Inexistenţa

în j_i a factorului $(2m)^{-1}$ este o problemă legată doar de normarea funcţiei de undă Ψ. Precum ştim din Electrodinamica clasică (relativistă, dar necuantică), componentele contravariante ale 4-vectorului densitate de curent a unui mediu continuu, de densitate proprie $\rho_0^{(e)}$ a sarcinii electrice, sunt date de expresia

$$j^i = \rho_0^{(e)} u^i \,, \tag{7.18}$$

unde u^i sunt componentele câmpului 4-vectorial al vitezei. În lungul unei linii de curent avem

$$u^4 = \frac{\mathrm{d}x^4}{\mathrm{d}\sigma} = \frac{\mathrm{d}t}{\mathrm{d}\sigma}\,, \text{ cu } (d\sigma)^2 = (dt)^2 - \delta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu = -\,ds^2\,, \tag{7.19}$$

deci, din

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}t} = \sqrt{1 - |\vec{v}|^2}\,,$$

rezultă imediat

$$j^4 = \frac{\rho_0^{(e)}}{\sqrt{1 - |\vec{v}|^2}} = \rho^{(e)}\,, \tag{7.20}$$

adică exact expresia densităţii de sarcină în referenţialul observatorului faţă de care fluidul încărcat se află în mişcare. Prin analogie, dacă

$$\vec{j} = -\,i\,[\Psi^*(\nabla\Psi) - (\nabla\Psi^*)\Psi]$$

este de tipul densităţii de curent

$$j^\mu = \rho_0^{(e)} \frac{\mathrm{d}x^\mu}{\mathrm{d}\sigma} \;\Rightarrow\; \vec{j} = \rho^{(e)}\,\vec{v}\,, \tag{7.21}$$

atunci a patra componentă contravariantă a 4-curentului de probabilitate,

$$j^4 = -\,j_4 = i\,[\Psi^*\Psi_{,4} - \Psi^*{}_{,4}\,\Psi]\,, \tag{7.22}$$

trebuie să fie o densitate, nu proprie, şi anume una de probabilitate. Aşadar, în Mecanica Cuantică relativistă (descriere uniparticulă), locul "tradiţionalei" densităţi de probabilitate (1.55) este luat de mărimea

$$\rho = i\left[\Psi^*\left(\frac{\partial\Psi}{\partial t}\right) - \left(\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right)\Psi\right] \tag{7.23}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

care se transformă ca o densitate, adică prin $[1-|\vec{v}|^2]^{-1/2}$, sub acţiunea grupului Lorentz propriu ortocron (pe care îl vom defini în Capitolul 9). În consecinţă, probabilitatea de detectare a particulei într-un domeniu D din $\mathbf{R}^3$ va fi dată de relaţia

$$\mathcal{P}_{\mathrm{D}} = \int_{\mathrm{D}\subset\mathbf{R}^3} \rho\, d^3x\,. \tag{7.24}$$

Să estimăm această probabilitate mai întâi pentru un tren de unde

$$\Psi(\vec{x},t) = \int d^3p\, \psi(\vec{p}) e^{ipx}\,,\quad px = \vec{p}\cdot\vec{x} - E_p t\,. \tag{7.25}$$

asociat unei particule *out* (adică de impuls $\vec{p}$ aliniat vectorului de poziţie $\vec{x}$, spre $|\vec{x}|\to\infty$), de energie pozitivă $E = E_p$. Avem

$$\begin{aligned}\frac{\partial\Psi}{\partial t} &= -i\int d^3p\, E_p\, \psi(\vec{p}) e^{ipx}\\ \frac{\partial\Psi^*}{\partial t} &= i\int d^3p\, E_p\, \psi^*(\vec{p}) e^{-ipx}\,,\end{aligned} \tag{7.26}$$

astfel încât expresia probabilităţii devine

$$\mathcal{P}_{\mathrm{D}} = \int_{\mathrm{D}} d^3x \int d^3p' d^3p\, \psi^*(\vec{p}\,')\psi(\vec{p})\,(E_p + E_{p'})\, e^{-i(p'-p)x}\,. \tag{7.27}$$

Extinzând D la întregul spaţiu $\mathbf{R}^3$, utilizând şi consecinţa[1]

$$\int_{\mathbf{R}^3} d^3x\, e^{-i(\vec{p}\,'-\vec{p})\cdot\vec{x}} e^{i(E_{p'}-E_p)t} = (2\pi)^3\delta(\vec{p}\,'-\vec{p})\, e^{i(E_{p'}-E_p)t} \equiv (2\pi)^3\delta(\vec{p}\,'-\vec{p}) \tag{7.28}$$

a reprezentării Fourier a funcţionalei δ-Dirac (pe spaţiul impulsurilor), obţinem

$$\mathcal{P} = \int d^3p' d^3p\,(2\pi)^3\delta(\vec{p}\,'-\vec{p})\,(E_{p'}+E_p)\,\psi^*(\vec{p}\,')\psi(\vec{p})\,,$$

adică

$$\mathcal{P} = \int d^3p\,\left[(2\pi)^3 2E_p\right]|\psi(\vec{p})|^2\,. \tag{7.29}$$

Prin introducerea amplitudinilor spectrale

$$\psi(\vec{p}) = \frac{\varphi(\vec{p})}{\sqrt{(2\pi)^3\, 2E_p}} \tag{7.30}$$

[1] observăm că, E_p fiind egal cu $\sqrt{|\vec{p}|^2+m^2}$, rezultă, pentru $\vec{p}\,' = \vec{p}$, că $E_{p'} = E_p$.

BCU IAŞI - CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi impunerea condiţiei de normare, pe întregul spaţiu $\mathbf{R}^3$, la

$$\mathcal{P} = 1\,,$$

rezultă expresia

$$\int d^3p\,|\varphi(\vec{p})|^2 \;=\; 1\,, \tag{7.31}$$

extrem de încurajatoare, datorită asemănării ei cu condiţia uzuală de normare

$$\sum_n |c_n|^2 \;=\; 1\,,$$

a probabilităţilor $|c_n|^2$ de realizare a stării proprii $|n\rangle$ a hamiltonianului unui sistem cuantic aflat în starea "superpozată"

$$|\psi\rangle \;=\sum_n c_n|n\rangle\,.$$

Necazul apare când facem exact acelaşi calcul pentru un tren *out*, dar de energie negativă, adică

$$\Psi(\vec{x},t) \;=\; \int d^3p\,\psi(\vec{p})e^{i(\vec{p}\cdot\vec{x}+E_pt)}\,. \tag{7.32}$$

Ca să păstrăm aceeaşi formă a fazei, trecem pe $\vec{p}$ în $-\vec{p}$ şi, notând $\chi(\vec{p}) = \psi(-\vec{p})$, rezultă

$$\Psi(\vec{x},t) \;=\; \int d^3p\,\chi(\vec{p})e^{-ipx}\;,\quad \text{cu}\;\; px = \vec{p}\cdot\vec{x} - E_pt\,. \tag{7.33}$$

Sunt valabile relaţiile

$$\begin{aligned}\frac{\partial\Psi}{\partial t} &= i\int d^3p\,E_p\,\chi(\vec{p})e^{-ipx}\\ \frac{\partial\Psi^*}{\partial t} &= -\,i\int d^3p\,E_p\,\chi^*(\vec{p})e^{ipx}\,,\end{aligned} \tag{7.34}$$

deci

$$\mathcal{P}_{\mathbf{D}} \;=\; -\int_{\mathbf{D}\subset\mathbf{R}^3} d^3x\int d^3p'd^3p\,\chi^*(\vec{p}\,')\chi(\vec{p})\;(E_p+E_{p'})\,e^{i(p'-p)x}\,. \tag{7.35}$$

Procedând ca în cazul energiilor pozitive, obţinem

$$\mathcal{P} \;=\; -\int d^3p\,\left[(2\pi)^3\,2E_p\right]|\chi(\vec{p})|^2 \tag{7.36}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi, normând amplitudinea spectrală $\chi(\vec{p})$ la $\varphi(\vec{p})$ prin acelaşi tip de relaţie, adică

$$\chi(\vec{p}) = \frac{\varphi(\vec{p})}{\sqrt{(2\pi)^3\, 2E_p}}\,, \tag{7.37}$$

rezultă de această dată, în mod clar, pentru particula liberă, dar de energie negativă,

$$\mathcal{P} = -\int d^3p\, |\varphi(\vec{p})|^2 = -1\,. \tag{7.38}$$

Mai mult decât atât, cum $\mathcal{P}$ corespunde pătratului normei vectorului de stare $|\psi\rangle$, rezultă că ar trebui să avem

$$\mathcal{P} = \sum_{n',\,n} c^*_{n'} c_n \langle n'|n\rangle = -1 \tag{7.39}$$

adică, păstrând ortogonalitatea stărilor proprii $|n\rangle$, ar rezulta

$$\sum_n |c_n|^2 = +1 \tag{7.40}$$

dar cu preţul unui efort imaginativ deosebit, anume acela de a concepe, cum spun fizicienii, stări proprii de normă negativă,

$$\langle n'|n\rangle = -\,\delta_{n'n}\,. \tag{7.41}$$

Din cauza extremei lor stranietăţi, ele au fost denumite *fantome*, *ghost-states* [17]. Deci, în formularea uniparticulă a Mecanicii Cuantice relativiste, devine tot mai evidentă afirmaţia că "într-adevăr, câmpul scalar nu a intrat uşor în teorie". Nu numai că ar trebui să acceptăm un univers de energie negativă, dar înseşi probabilităţile în acest univers ar fi fictive. Cu puţin înaintea apariţiei Teoriei Cuantice a Câmpurilor, situaţia devenise atât de gravă, încât unii fizicieni chiar se gândeau că, în natură, în stare fundamentală – ca elemente de bază – câmpurile scalare nici nu pot exista. Descoperirea celor trei mezoni, $\pi^{\pm}$ şi π^0, le-a infirmat supoziţiile şi a impulsionat cercetările. Astfel, se confirma faptul că ecuaţia Klein–Gordon şi, respectiv, ecuaţia Dirac (pentru fermioni), erau în esenţă corecte, conducând la rezultate confirmabile experimental. Pur şi simplu, ele pot fi postulate, deci luate ca atare. Ceea ce era în neregulă, era imaginea uniparticulă din cuantica relativistă, la energii mari apărând, inevitabil, *antiparticulele*; deci avem nevoie de o "cuantică a sistemelor cu număr

de particule variabil". Această teorie, generic denumită adesea şi *de a doua cuantificare* (referindu-se la necesitatea cuantificării nu numai a observabilelor uzuale, precum energia, impulsul, momentul cinetic etc., dar chiar şi a funcţiei de undă), interpretează câmpul $\Psi(\vec{x}, t)$, sau oricum dorim să-l notăm, ca un operator (sugestiv denumit *de câmp*), nu neapărat hermitic, ce acţionează pe un spaţiu Hilbert special, numit *spaţiul Fock al stărilor multi-particulă*, creând sau anihilând particule. Aşa cum spuneam, o detaliere a teoriilor de cuantificare a câmpurilor depăşeşte cadrul prezentei lucrări, ea fiind obiectul multor tratate dedicate acestei probleme [13, 37]. Totuşi, în ultimul capitol, vom dezvolta câteva elemente de Teoria Cuantică a Câmpurilor.

7.3 Formalismul lagrangeian

Chiar şi în cel mai simplu caz al formulării unei teorii cuantice a particulei relativiste libere, de spin zero, există două elemente fundamentale: un câmp scalar, în general complex, $\phi : M_4 \to \mathbf{C}$, în relaţie cu particula printr-un sistem logic de reguli de interpretare (dependente de natura teoriei) şi o funcţională cu valori reale $S[\phi^*, \phi]$ definită pe mulţimea $C^{r\geq 2}(M_4; \mathbf{C})$ a funcţiilor complexe r-diferenţiabile pe M_4, prin relaţia

$$S[\phi^*, \phi] = -\int d^4x\, \mathcal{L}(\phi^*,\, \phi,\, \partial\phi^*,\, \partial\phi)\,, \tag{7.42}$$

unde funcţia $-\mathcal{L}$, dependentă explicit numai de câmp, conjugata sa complexă şi derivatele parţiale de ordinul I ale acestora în raport cu coordonatele $(x^i)_{i=\overline{1,4}} = (\vec{x}, t)$ pe M_4, este densitatea invariantă de lagrangeian.[2] Dat fiind că această funcţională, prin "punctele" sale de staţionaritate, stabileşte dinamica sistemului, ea a primit numele de *acţiune* şi este global invariantă faţă de semiprodusul direct al grupurilor Poincaré şi $U(1)$. În toate etapele aplicării procedeului variaţional, densitatea (invariantă) de lagrangeian are, sub aspect tehnic, rolul principal, de forma ei concretă depinzând atât desfăşurarea spaţio-temporală a câmpului, cât şi – într-un sens mai larg – proprietăţile şi valorile observabilelor sale fundamentale, cum ar fi impulsul, energia, momentul cinetic orbital, curentul şi sarcina. Cu un asemenea factor de impact, este lesne de înţeles de ce adepţii axiomatizării teoriilor de câmp preferă postularea formei

[2] Justificarea semnului minus, care apare în convenţia de signatură +2, se găseşte în lucrarea [13], dedicată Teoriei Cuantice a Câmpurilor.

funcţiei $-\mathcal{L}$ pentru fiecare clasă de câmpuri în parte. Deşi acest punct de vedere are, în mod cert, avantajele sale – eleganţă, cursivitate în formulare, globalitate în tratarea riguroasă a aspectelor matematice esenţiale – cunoaşterea unor metode (sau artificii) de deducere (sau, cel puţin, de justificare) a densităţii de lagrangeian măreşte adesea gradul de înţelegere, favorizează memorarea "punctelor fierbinţi" ale teoriei – prin accentuarea rolului exemplificativ – şi consolidează infrastructura necesară dezvoltării unor teorii mai complicate. În stadiul actual al Fizicii, asemenea metode sau procedee există pentru toate câmpurile libere şi pentru majoritatea sistemelor de câmpuri ce se supun geometriei de *gauge*-invarianţă.

Pentru obţinerea densităţii invariante de lagrangeian a câmpului scalar complex (liber), procedeul este simplu şi elegant, servind, în decursul timpului, ca sursă de inspiraţie şi pentru deducerea unor lagrangeieni mai complicaţi, cum ar fi cei din teoria stringurilor [31]. Se are în vedere, în primul rând, constrângerea geometrică fundamentală

$$\eta_{ik}u^i u^k = -1\,, \tag{7.43}$$

a 4-vitezei unei particule, pentru ca aceasta să survoleze cauzal spaţiu-timpul Minkowski. Înmulţind cu m^2 ambii membri, obţinem

$$\eta^{ik}p_i p_k + m^2 = 0 \tag{7.44}$$

şi aplicând principiul corespondenţei, $p_i \to -i\partial_i$, rezultă imediat relaţia (7.4) şi conjugata ei complexă

$$\phi^*\left(\Box - m^2\right) = 0 \tag{7.45}$$

pe care am scris-o cu acţiunea operatorului Gordon, $\Box - m^2$, la stânga, pentru a înlesni consideraţiile ce urmează. Cum, intuitiv, în referenţialul propriu şi în termenii descrierii uniparticulă, mărimea $\phi^*\phi$ reprezintă densitatea invariantă de probabilitate, iar funcţionala acţiune se exprimă şi în raport cu aceasta, rezultă că variaţiile ei virtuale vor fi, în cel mai simplu caz, de forma

$$\delta(\phi^*\phi) = (\delta\phi^*)\phi + \phi^*(\delta\phi)\,. \tag{7.46}$$

Aşadar, vom înmulţi ecuaţia Gordon în stânga cu $\delta\phi^*$, conjugata ei complexă, în dreapta cu $\delta\phi$ şi vom integra pe co-volumul d^4x suma celor două rezultate. Obţinem ecuaţia

$$\int\left\{\delta\phi^*\left[\left(\Box - m^2\right)\phi\right] + \left[\phi^*\left(\Box - m^2\right)\right]\delta\phi\right\} d^4x = 0\,, \tag{7.47}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

adică, separând termenii masici,

$$\int \left[\delta\phi^*(\Box\phi) + (\Box\phi^*)\delta\phi - m^2\,\delta(\phi^*\phi)\right] d^4x = 0\,. \tag{7.48}$$

Integrând prin părţi în primii doi termeni, rezultă

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad \int \delta\phi^*(\Box\phi)\, d^4x = \int \left(\eta^{ik}(\delta\phi^*)\phi_{,k}\right)_{,i} d^4x - \int \eta^{ik}(\delta\phi^*)_{,i}\,\phi_{,k}\, d^4x\,, \\ &\text{b)}\quad \int (\Box\phi^*)\delta\phi\, d^4x = \int \left(\eta^{ik}\phi^*{}_{,k}\,\delta\phi\right)_{,i} d^4x - \int \eta^{ik}\phi^*{}_{,k}\,(\delta\phi)_{,i}\, d^4x\,, \end{aligned} \tag{7.49}$$

ceea ce aduce ecuaţia la forma (aplicând teorema Green–Gauss–Ostrogradski)

$$\oint \eta^{ik}\left[(\delta\phi^*)\phi_{,k} + \phi^*{}_{,k}\,\delta\phi\right] dS_k - \delta \int \left[\eta^{ik}\phi^*{}_{,i}\,\phi_{,k} + m^2\,\phi^*\phi\right] d^4x = 0\,. \tag{7.50}$$

Cum prima integrală (pe 3-suprafaţa netedă pe porţiuni $\partial\mathbf{D}$ ce închide domeniul arbitrar $\mathbf{D}$ din M_4) se anulează, în virtutea condiţiilor standard

$$\delta\phi|_{\partial\mathbf{D}} = \delta\phi^*|_{\partial\mathbf{D}} = 0$$

ale procedeului variaţional, obţinem ecuaţia de staţionaritate

$$\delta S = 0 \tag{7.51}$$

a funcţionalei acţiune (7.42) a câmpului scalar complex, având funcţia caracteristică

$$\mathcal{L}[\phi^*, \phi] = \eta^{ik}\phi^*{}_{,i}\,\phi_{,k} + m^2\,\phi^*\phi \tag{7.52}$$

de definire a densităţii de lagrangeian.

Referitor la convenţiile de semn, se cuvine să facem următoarea observaţie. În aşa-numita signatură $\sigma = -2$, tensorul metric fundamental este

$$\eta_{(-2)} = \mathrm{diag}[1, -1, -1, -1]\,,$$

cu prima poziţie pentru termenul temporal $(dx^0)^2 = (dt)^2$. Din acest motiv, cele două metrici, respectiv de signatură $\sigma = \pm 2$, vor fi corelate printr-o schimbare de semn şi o reindexare $x^4 \leftrightarrow x^0$. Ca urmare, trecând de la signatura $+2$, în

care am formulat funcţia $\mathcal{L}[\phi^*, \phi]$, la signatura -2, densitatea de lagrangeian, $-\mathcal{L}$, capătă expresia

$$-\mathcal{L}_{(2)}[\phi^*, \phi] \to -\left[-\eta^{\mu\nu}_{(-2)}\phi^*{}_{,\mu}\,\phi_{,\nu} + m^2\,\phi^*\phi\right] = \mathcal{L}_{(-2)}[\phi^*, \phi]\,,$$

cu $\mu, \nu = \overline{0,3}$, adică devine exact densitatea de lagrangeian

$$\mathcal{L}[\phi^*, \phi] = \eta^{\mu\nu}\phi^*{}_{,\mu}\,\phi_{,\nu} - m^2\,\phi^*\phi \tag{7.53}$$

întâlnită în majoritatea cărţilor de Fizica Particulelor Elementare ce utilizează, oarecum din motive de tradiţie, convenţia de signatură -2. Desigur, dacă sunt aplicate consecvent, cele două convenţii conduc la aceleaşi rezultate.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Capitolul 8

Câmpul spinorial

8.1 Ecuaţia lui Dirac

Liniarizarea radicalului din (7.2) a fost rezolvată de Dirac, în 1928, prin scrierea acestuia sub forma [15]

$$\sqrt{\vec{p}^2 + m^2c^2} = \alpha_1 p_x + \alpha_2 p_y + \alpha_3 p_z + \alpha_4 mc, \tag{8.1}$$

astfel încât, în algebra din care fac parte coeficienţii α_i, să avem o relaţie de tipul

$$\alpha_i \alpha_k + \alpha_k \alpha_i = 2\delta_{ik} I, \tag{8.2}$$

cu $i, k = \overline{1,4}$ şi I fiind elementul unitate. Relaţia (8.2), a cărei soluţie o căutăm în algebra matricelor, este echivalentă cu

$$\alpha_i \alpha_k = -\alpha_k \alpha_i, \quad \text{pentru } i \neq k \tag{8.3}$$

şi

$$\alpha_i^2 = I \text{ (matricea unitate)}. \tag{8.4}$$

Constatăm următoarele:

1. Există matricea

$$\alpha_5 = \alpha_1 \alpha_2 \alpha_3 \alpha_4 \tag{8.5}$$

al cărei pătrat este I şi care anticomută cu matricele α_i.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Demonstraţie

Din (8.3, 4) şi (8.5), obţinem imediat

$$\alpha_5^2 = \alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4 = -\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_1\alpha_2\alpha_3(\alpha_4\alpha_4) =$$
$$= -\alpha_1\alpha_2\alpha_1\alpha_2(\alpha_3\alpha_3)I = \alpha_1^2\alpha_2^2 = I,$$

adică, în general,

$$\alpha_5^2 = I \tag{8.6}$$

şi

$$\alpha_1\alpha_5 = \alpha_1\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4 = -\alpha_1\alpha_2\alpha_3\alpha_4\alpha_1 = -\alpha_5\alpha_1 \; etc.,$$

adică

$$\alpha_i\alpha_5 + \alpha_5\alpha_i = 0. \tag{8.7}$$

q.e.d.

2. Trasa matricelor α_i, definită ca suma elementelor de pe diagonală, este nulă.

Demonstraţie

Ţinând cont de proprietăţile (8.6, 7) ale matricei α_5, precum şi de faptul că $\mathbf{Tr}\,ABC = \mathbf{Tr}\,CAB$, putem scrie, pentru fiecare matrice α_i, relaţia

$$\mathrm{Tr}\,\alpha_i = \mathrm{Tr}\,\alpha_i\alpha_5\alpha_5 = \mathrm{Tr}\,\alpha_5\alpha_i\alpha_5 = -\mathrm{Tr}\,\alpha_i\alpha_5\alpha_5 = -\mathrm{Tr}\,\alpha_i,$$

adică

$$\mathrm{Tr}\,\alpha_i = 0. \tag{8.8}$$

q.e.d.

3. Alegând matricea α_4 în reprezentare proprie, avem forma bloc-diagonală (1 fiind o matrice unitate, iar 0 fiind matricea nulă corespunzătoare)

$$\alpha_4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{8.9}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

deci, datorită relaţiei (8.8), matricele α_i trebuie să aibă un număr par de linii şi coloane. Din Capitolul 3, ştim că matricele Pauli satisfac relaţia (3.63), care este de forma (8.2), dar acestea sunt doar trei. Pentru a construi patru matrice liniar independente, $\{\alpha_i\}_{i=\overline{1,4}}$, care să aibă proprietăţile enunţate, trebuie să le căutăm printre matricele cu patru linii şi patru coloane. Se constată că următoarele matrice (4×4), construite din matrice cu câte două linii şi două coloane, adică

$$\alpha_i = \begin{pmatrix} \sigma_{i11} & \sigma_{i12} \\ \sigma_{i21} & \sigma_{i22} \end{pmatrix}, \quad \alpha_4 = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & -\varepsilon \end{pmatrix}, \quad \text{unde } \varepsilon = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{8.10}$$

satisfac proprietatea

$$\alpha_i \alpha_4 + \alpha_4 \alpha_i = 0,$$

adică

$$\begin{pmatrix} \sigma_{i11} & -\sigma_{i12} \\ \sigma_{i21} & -\sigma_{i22} \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \sigma_{i11} & \sigma_{i12} \\ -\sigma_{i21} & -\sigma_{i22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{8.11}$$

dacă

$$\sigma_{i11} = \sigma_{i22} = 0.$$

Impunând condiţia

$$\alpha_i^\dagger = \alpha_i,$$

rezultă forma concretă a *matricelor Dirac* [15]

$$\vec{\alpha} = \begin{pmatrix} 0 & \vec{\sigma} \\ \vec{\sigma} & 0 \end{pmatrix}; \quad \alpha_4 \equiv \beta = \begin{pmatrix} \varepsilon & 0 \\ 0 & -\varepsilon \end{pmatrix}, \tag{8.12}$$

$\vec{\sigma}$ fiind matricele lui Pauli, iar ε fiind matricea unitate 2×2.

Utilizând, în hamiltonianul (7.8), liniarizarea (8.1), obţinem *ecuaţia lui Dirac* [3]

$$\left[c\vec{\alpha} \cdot \left(\hat{\vec{P}} - q\vec{A}\right) + \beta mc^2\right] |\psi\rangle = \left(\hat{E} - qV\right) |\psi\rangle, \tag{8.13}$$

unde $|\psi\rangle$ este matricea coloană, denumită *bispinor*,

$$|\psi\rangle = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}. \tag{8.14}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Înlocuim operatorii din (8.13) cu expresiile lor (2.4, 6) şi aducem ecuaţia Dirac la forma

$$\left[c\,\vec{\alpha}\cdot\left(\frac{\hbar}{i}\nabla - q\vec{A}\right) + \beta mc^2\right]\psi = \left(-\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} - qV\right)\psi, \tag{8.15}$$

cu adjuncta

$$\psi^\dagger\left[c\,\vec{\alpha}\left(-\frac{\hbar}{i}\nabla - q\vec{A}\right) + \beta mc^2\right] = \psi^\dagger\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial t} - qV\right), \tag{8.16}$$

unde

$$\psi^\dagger = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* & \psi_3^* & \psi_4^* \end{pmatrix}. \tag{8.17}$$

Înmulţim ecuaţia (8.15), din stânga, cu $\psi^\dagger$ şi adunând-o la ecuaţia (8.16), înmulţită din dreapta cu $-\psi$, obţinem *ecuaţia de continuitate*

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^\dagger\psi\right) + \nabla\cdot\left(c\psi^\dagger\vec{\alpha}\psi\right) = 0. \tag{8.18}$$

8.2 Consecinţe ale ecuaţiei Dirac

În acest paragraf, vom utiliza metrica $\delta_{ik}\,dx^i dx^k$, cu $x^4 = ict$.

8.2.1 Momentul magnetic propriu al electronului

Introducând cuadrivectorul

$$\hat{p}_4 = \frac{1}{c}(\hat{E} - eV)\ ;\ \hat{\vec{p}} = \hat{\vec{P}} - e\vec{A}, \tag{8.19}$$

ecuaţia Dirac (8.13) capătă forma

$$\left[\hat{p}_4 - \vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}} - \beta mc\right]\psi = 0, \tag{8.20}$$

pe care o înmulţim, din stânga, cu $\left[\hat{p}_4 + \vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}} + \beta mc\right]$ şi obţinem

$$\left\{\hat{p}_4^2 + \left[\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}},\,\hat{p}_4\right] - (\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}})^2 - (\beta\vec{\alpha} + \vec{\alpha}\beta)\cdot\hat{\vec{p}}mc - m^2c^2\right\}\psi = 0.$$

Ţinând cont că $\beta\vec{\alpha} + \vec{\alpha}\beta = 0$, avem

$$\left\{\left[\hat{p}_4^2 - \hat{\vec{p}}^{\,2} - m^2c^2\right] - \left[(\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}})^2 - \hat{\vec{p}}^{\,2}\right] - \vec{\alpha}\cdot\left[\hat{\vec{p}}_4,\,\hat{\vec{p}}\right]\right\}\psi = 0. \tag{8.21}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

În expresia

$$\begin{aligned}(\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}})^2-\hat{\vec{p}}^{\,2} &= (\alpha_1\hat{p}_1+\alpha_2\hat{p}_2+\alpha_3\hat{p}_3)^2-\left(\hat{p}_1^2+\hat{p}_2^2+\hat{p}_3^2\right)= \\ &= \alpha_1\alpha_2\,\hat{p}_1\hat{p}_2+\alpha_2\alpha_1\,\hat{p}_2\hat{p}_1+\ldots= \\ &= \alpha_1\alpha_2\,(\hat{p}_1\hat{p}_2-\hat{p}_2\hat{p}_1)+\ldots \end{aligned} \tag{8.22}$$

efectuăm înlocuirea

$$\begin{aligned}[\hat{p}_1\,,\,\hat{p}_2] &= \left[\hat{P}_1-eA_x\,,\,\hat{P}_2-eA_y\right]=-e\left\{\left[\hat{P}_1\,,\,A_y\right]-\left[\hat{P}_2\,,\,A_x\right]\right\}= \\ &= -\frac{e\hbar}{i}\left(\frac{\partial A_y}{\partial x}-\frac{\partial A_x}{\partial y}\right)=-\frac{\hbar}{i}\,B_z \end{aligned} \tag{8.23}$$

şi, introducând notaţia

$$\alpha_1\alpha_2=i\tau_3\,;\quad \alpha_2\alpha_3=i\tau_1\,;\quad \alpha_3\alpha_1=i\tau_2\,, \tag{8.24}$$

găsim

$$\left(\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}}\right)^2-\hat{\vec{p}}^{\,2}=-e\hbar\,\vec{\tau}\cdot\vec{B}\,. \tag{8.25}$$

În mod analog, rezultă

$$\left[\hat{p}_4\,,\,\hat{\vec{p}}\right]=-\frac{e\hbar}{ic}\,\vec{E}\,. \tag{8.26}$$

Cu ajutorul relaţiilor (8.25) şi (8.26), ecuaţia (8.21) devine

$$\left\{\left[\hat{p}_4^2-\hat{\vec{p}}^{\,2}-m^2c^2\right]+e\hbar\,\vec{\tau}\cdot\vec{B}+\frac{e\hbar}{ic}\,\vec{\alpha}\cdot\vec{E}\right\}\psi=0\,, \tag{8.27}$$

unde, pentru viteze mici, termenul $\vec{p}^{\,2}/2m$ are semnificaţia energiei clasice. De aceea, înmulţim ecuaţia (8.27) cu $-1/2m$ şi, interpretând termenii

$$\begin{aligned} W_m &= -\frac{e\hbar}{2m}\,\vec{\tau}\cdot\vec{B}\,; \\ W_e &= -\frac{e\hbar}{2imc}\,\vec{\alpha}\cdot\vec{E} \end{aligned} \tag{8.28}$$

ca *energia dipolului magnetic*, respectiv *electric*, într-un câmp electromagnetic, obţinem următoarele expresii ale *momentelor magnetic* şi, respectiv, *electric propriu ale electronului*:

$$\begin{aligned} \vec{\mu}_m &= \frac{e\hbar}{2m}\,\vec{\tau}\,; \\ \vec{\mu}_e &= \frac{e\hbar}{2imc}\,\vec{\alpha}\,. \end{aligned} \tag{8.29}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

În ceea ce privește matricele $\vec{\tau}$, expresiile concrete ale acestora se calculează imediat, adică

$$\tau_1 = \frac{1}{i}\alpha_2\,\alpha_3 = \frac{1}{i}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0 & \sigma_3 \\ \sigma_3 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 \\ 0 & \sigma_1 \end{pmatrix} \; etc.\,,$$

şi obţinem, în general,

$$\vec{\tau} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}. \tag{8.30}$$

8.2.2 Spinul electronului

Utilizând liniarizarea (8.1) în (7.2), obţinem hamiltonianul electronului liber

$$\hat{H} \,=\, c(\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}}) + \beta mc^2\,, \;\; \text{cu} \;\; \hat{p} = \frac{\hbar}{i}\nabla\,, \tag{8.31}$$

al cărui comutator cu momentul cinetic orbital, adică

$$\left[\hat{H}\,,\,\hat{\vec{L}}\right] \,=\, c\left[\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}},\,\vec{r}\times\hat{\vec{p}}\right] = \frac{e\hbar}{i}\,\vec{\alpha}\times\vec{p}, \tag{8.32}$$

este diferit de zero. Căutăm un moment cinetic compensator, de forma

$$\hat{\vec{S}} = k\,\vec{\tau}, \tag{8.33}$$

care să asigure conservarea momentului cinetic total. Astfel, din comutatorii

$$\left[\hat{H}\,,\,\tau_1\right] \,=\, c\,\left[\vec{\alpha}\cdot\hat{\vec{p}},\,\tau_1\right] \,=\, \frac{c}{i}\,[\alpha_1\,\hat{p}_1 + \alpha_2\,\hat{p}_2 + \alpha_3\,\hat{p}_3\,,\,\alpha_2\,\alpha_3] \,=$$

$$= \frac{c}{i}\,\{[\alpha_2\,,\,\alpha_2\alpha_3]\,\hat{p}_2 \,+\, [\alpha_3\,,\,\alpha_2\alpha_3]\,\hat{p}_3\} \,=\, \frac{2c}{i}\,(\alpha_3\hat{p}_2 - \alpha_2\hat{p}_3) \;\; etc.\,,$$

adică

$$\left[\hat{H}\,,\,\vec{\tau}\right] \,=\, -\,\frac{2c}{i}\,\vec{\alpha}\times\hat{\vec{p}},$$

obţinem relaţia

$$\left[\hat{H}\,,\,\hat{\vec{S}}\right] \,=\, -\,\frac{2c}{i}\,k\,\vec{\alpha}\times\hat{\vec{p}}. \tag{8.34}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Pentru ca momentul cinetic total $\hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$ să se conserve, adică $\left[\hat{H}, \hat{\vec{J}}\right] = 0$, trebuie să considerăm $k = \hbar/2$, adică momentul cinetic propriu (spinul electronului) trebuie să aibă expresia

$$\hat{\vec{S}} = \frac{\hbar}{2}\vec{\tau}. \tag{8.35}$$

Considerând interacţiunea spin–orbită (6.126), generalizarea rezultatului relativist (7.14) – obţinut prin neluarea în considerare a spinului microparticulei –, pentru nivelurile atomului de hidrogen, capătă forma

$$E_{nj} = mc^2\left\{1+\alpha^2\left[\left(n-j-\frac{1}{2}\right)+\left(j+\frac{1}{2}\right)\sqrt{1-\frac{\alpha^2}{(j+\frac{1}{2})^2}}\right]^{-2}\right\}^{-1} \tag{8.36}$$

a cărei dezvoltare în serie, în limita nerelativistă,

$$E_{nj} \approx mc^2 - \frac{me^4}{2\hbar^2 n^2} + \frac{mc^2\alpha^4}{2n^4}\left(\frac{3}{4}-\frac{n}{j+\frac{1}{2}}\right), \tag{8.37}$$

explică vestita structură fină a spectrului hidrogenului.

8.2.3 Aproximaţia nerelativistă

În ecuaţia Dirac (8.13), bispinorul (8.14) poate fi exprimat în funcţie de doi spinori (matrice coloană cu câte două componente) [3]

$$\psi = \begin{pmatrix}\phi\\ \Theta\end{pmatrix};\ \phi = \begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\end{pmatrix};\ \Theta = \begin{pmatrix}\psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix} \tag{8.38}$$

şi, utilizând reprezentarea (8.12), obţinem

$$(\hat{E}-qV)\begin{pmatrix}\phi\\ \Theta\end{pmatrix} - c\hat{\vec{p}}\begin{pmatrix}0 & \vec{\sigma}\\ \vec{\sigma} & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi\\ \Theta\end{pmatrix} - mc^2\begin{pmatrix}\varepsilon & 0\\ 0 & -\varepsilon\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\phi\\ \Theta\end{pmatrix} = 0,$$

adică ecuaţia Dirac (8.13) se reduce la sistemul de două ecuaţii cuplate

$$\begin{aligned}(\hat{E}-qV)\phi - c\hat{\vec{p}}\cdot\vec{\sigma}\,\Theta - mc^2\varepsilon\,\phi &= 0\\ (\hat{E}-qV)\Theta - c\hat{\vec{p}}\cdot\vec{\sigma}\,\phi + mc^2\varepsilon\,\Theta &= 0.\end{aligned} \tag{8.39}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Separăm energia proprie, punând

$$\phi = \varphi e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t}$$
$$\Theta = \theta e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t} \tag{8.40}$$

şi, cum

$$\hat{E}\phi = \left[\hat{E}\varphi + mc^2\varphi\right] e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t}$$
$$\hat{E}\Theta = \left[\hat{E}\theta + mc^2\theta\right] e^{-\frac{imc^2}{\hbar}t},$$

ecuaţiile (8.39) devin

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad (\hat{E} - qV)\,\varphi - c\vec{p}\cdot\vec{\sigma}\,\theta = 0 \\ &\text{b)} \quad 2mc^2\,\theta + (\hat{E} - qV)\,\theta - c\vec{p}\cdot\vec{\sigma}\,\varphi = 0\,. \end{aligned} \tag{8.41}$$

Aproximaţia nerelativistă presupunând

$$\left|\left(\hat{E} - qV\right)\theta\right| \ll \left|2mc^2\,\theta\right|,$$

rezultă, din (8.41.b), expresia

$$\theta = \frac{\hat{\vec{p}}\cdot\vec{\sigma}}{2mc}\varphi, \tag{8.42}$$

care, introdusă în (8.41.a), ne conduce la *ecuaţia lui Pauli*

$$\left(\hat{E} - qV\right)\varphi - \frac{1}{2m}(\vec{p}\cdot\vec{\sigma})^2\,\varphi = 0\,. \tag{8.43}$$

Din (8.42) se observă că θ (deci ψ_3, ψ_4) este de v/c ori mai mic decât φ (adică ψ_1, ψ_2).

Menţionăm că, pentru a calcula valoarea medie a momentului magnetic şi a momentului electric propriu al electronului, trebuie să se expliciteze integralele

$$\langle\vec{\tau}\rangle = \int \psi^\dagger\,\vec{\tau}\,\psi\,dv\,,$$
$$\langle\vec{\alpha}\rangle = \int \psi^\dagger\,\vec{\alpha}\,\psi\,dv\,, \tag{8.44}$$

BCU ASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

conţinând expresii de forma

$$\psi^\dagger \tau_1 \psi = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* & \psi_3^* & \psi_4^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix} etc.\,,$$

adică

$$\begin{aligned} \psi^\dagger \tau_1 \psi &= \psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1 + \psi_3^* \psi_4 + \psi_4^* \psi_3 \\ \psi^\dagger \tau_2 \psi &= i\,(-\psi_1^* \psi_2 + \psi_2^* \psi_1 - \psi_3^* \psi_4 + \psi_4^* \psi_3) \\ \psi^\dagger \tau_3 \psi &= \psi_1^* \psi_1 - \psi_2^* \psi_2 + \psi_3^* \psi_3 - \psi_4^* \psi_4\,, \end{aligned} \tag{8.45}$$

şi

$$\begin{aligned} \psi^\dagger \alpha_1 \psi &= \psi_1^* \psi_4 + \psi_2^* \psi_3 + \psi_3^* \psi_2 + \psi_4^* \psi_1 \\ \psi^\dagger \alpha_2 \psi &= i\,(-\psi_1^* \psi_4 + \psi_2^* \psi_3 - \psi_3^* \psi_2 + \psi_4^* \psi_1) \\ \psi^\dagger \alpha_3 \psi &= \psi_1^* \psi_3 - \psi_2^* \psi_4 + \psi_3^* \psi_1 - \psi_4^* \psi_2\,, \end{aligned} \tag{8.46}$$

deci $\vec{\alpha}$ introduce un factor v/c, deoarece fiecare termen conţine una dintre componentele ψ_3, ψ_4, ψ_3^* sau ψ_4^*.

8.3 Transformările Foldy–Wouthuysen

În ecuaţiile Dirac (8.39), componentele $\begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{pmatrix}$ şi $\begin{pmatrix} \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$ apar în aceeaşi ecuaţie a sistemului de patru ecuaţii diferenţiale, datorită unor operatori de tipul lui $\vec{\alpha}$, daţi de (8.12), numiţi *operatori impari*, spre deosebire de *operatorii pari*, de tipul I, β, $\vec{\tau}$, care, având forme bloc-diagonale, – vezi (8.12) şi (8.30) – nu amestecă stările de energie pozitivă cu cele de energie negativă (după cum vom vedea în paragraful următor).

Transformările Foldy–Wouthuysen, ca transformări unitare de forma [3]

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad \psi' = e^{+iS}\psi\,; \\ &\text{b)}\quad \hat{A}' = e^{+iS}\,\hat{A}\,e^{-iS}\,,\ \text{cu}\ S^\dagger = S\,, \end{aligned} \tag{8.47}$$

au drept scop eliminarea, cel puţin într-o aproximaţie dată, a operatorilor impari.

PCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Pentru simplificarea calculelor, vom lucra în unităţi naturale şi vom omite semnul circomflex de la operatori.

Dezvoltăm în serie transformarea (8.47.b), adică

$$F(\lambda) \equiv e^{i\lambda S} A e^{-i\lambda S} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda^n}{n!} \left(\frac{\partial^n F}{\partial \lambda^n} \right) \Bigg|_{\lambda=0} , \tag{8.48}$$

unde λ este un parametru real şi conduce, pentru $\lambda = 1$, la transformarea căutată. De aici, prin derivare, obţinem

$$\begin{aligned} \frac{\partial F}{\partial \lambda} &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \left\{ \left[1 + i\lambda S + \frac{(i\lambda S)^2}{2!} + \ldots \right] A \left[1 - i\lambda S + \frac{(i\lambda S)^2}{2!} - \ldots \right] \right\} = \\ &= \left[iS + \lambda (iS)^2 + \ldots \right] A \left[1 - i\lambda S + \frac{(i\lambda S)^2}{2!} - \ldots \right] + \\ &+ \left[1 + i\lambda S + \frac{(i\lambda S)^2}{2!} + \ldots \right] A \left[-iS + \lambda (iS)^2 - \ldots \right] = \\ &= e^{i\lambda S} iS A e^{-i\lambda S} - e^{i\lambda S} i A S e^{-i\lambda S} , \end{aligned}$$

deci

$$\frac{\partial F}{\partial \lambda} = e^{i\lambda S} i [S, A] e^{-i\lambda S} . \tag{8.49}$$

Vom arăta, prin inducţie completă, că derivata de ordin n se calculează cu ajutorul formulei

$$\frac{\partial^n F}{\partial \lambda^n} = e^{i\lambda S} i^n [S, [S, \ldots, [S, A \underbrace{]\ldots]]}_{n \text{ ori}} e^{-i\lambda S} . \tag{8.50}$$

Astfel, pentru $n = 1$, relaţia (8.50) se reduce la (8.49), deci este adevărată. Presupunem acum că relaţia (8.50) este adevărată pentru n. Utilizând notaţia

$$B = i^n [S, [S, \ldots, [S, A] \ldots]] , \tag{8.51}$$

rezultă

$$\begin{aligned} \frac{\partial^{n+1} F}{\partial \lambda^{n+1}} &= \frac{\partial}{\partial \lambda} \left(e^{i\lambda S} B e^{-i\lambda S} \right) = e^{i\lambda S} i [S, B] e^{-i\lambda S} = \\ &= e^{i\lambda S} i^{n+1} [S, [S, [S, \ldots, [S, A \underbrace{]\ldots]]]}_{n+1 \text{ ori}} e^{-i\lambda S} . \end{aligned}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Relaţia (8.50) implică

$$\left(\frac{\partial^n F}{\partial \lambda^n}\right)\Big|_{\lambda=0} = i^n [S, [S, \ldots, [S, A \underbrace{]\ldots]}_{n \text{ ori}}], \tag{8.52}$$

şi aduce transformarea (8.48) la forma

$$\begin{aligned} e^{iS} A e^{-iS} &= A + i[S, A] + \frac{i^2}{2}[S, [S, A]] + \ldots + \\ &+ \frac{i^n}{n!}[S, [S, \ldots, [S, A \underbrace{]\ldots]}_{n \text{ ori}}] + \ldots \end{aligned} \tag{8.53}$$

Pentru a transforma ecuaţia de evoluţie

$$H\psi = i\frac{\partial \psi}{\partial t}, \tag{8.54}$$

îl exprimăm pe ψ din (8.47.a) sub forma $\psi = e^{-iS}\psi'$ şi, înlocuind în (8.54), obţinem

$$H e^{-iS}\psi' = i\frac{\partial}{\partial t}\left(e^{-iS}\psi'\right),$$

adică

$$H e^{-iS}\psi' = \left(i\frac{\partial}{\partial t} e^{-iS}\right)\psi' + i e^{-iS}\frac{\partial \psi'}{\partial t},$$

sau

$$\left[e^{iS}\left(H - i\frac{\partial}{\partial t}\right)e^{-iS}\right]\psi' = i\frac{\partial \psi'}{\partial t},$$

deci ecuaţia (8.54) a căpătat forma

$$H'\psi' = i\frac{\partial \psi'}{\partial t}, \tag{8.55}$$

cu hamiltonianul transformat

$$H' = e^{iS}\left(H - i\frac{\partial}{\partial t}\right)e^{-iS}. \tag{8.56}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

În (8.56), al doilea termen al membrului drept are expresia

$$\begin{aligned} e^{iS}\left(i\frac{\partial}{\partial t}\right)e^{-iS} &= \left(1+iS-\frac{S^2}{2}-\frac{i}{6}S^3+\ldots\right)\times \\ &\quad \times i\frac{\partial}{\partial t}\left(1-iS-\frac{S^2}{2}+\frac{i}{6}S^3+\ldots\right)= \\ &= \left(1+iS-\frac{S^2}{2}-\ldots\right)\times \\ &\quad \times\left[\dot{S}-\frac{i}{2}\left(S\dot{S}+\dot{S}S\right)-\frac{1}{6}\left(SS\dot{S}+S\dot{S}S+\dot{S}SS\right)+\ldots\right]= \\ &= \dot{S}-\frac{i}{2}S\dot{S}-\frac{i}{2}\dot{S}S-\frac{1}{6}SS\dot{S}-\frac{1}{6}S\dot{S}S-\frac{1}{6}\dot{S}SS+ \\ &\quad +i\,S\,\dot{S}+\frac{1}{2}SS\dot{S}+\frac{1}{2}S\dot{S}S- \\ &\quad -\frac{1}{2}SS\dot{S}+\ldots= \\ &= \dot{S}+\frac{i}{2}\left(S\dot{S}-\dot{S}S\right)-\frac{1}{6}SS\dot{S}+\frac{1}{6}S\dot{S}S+\frac{1}{6}S\dot{S}S-\frac{1}{6}\dot{S}SS+\ldots \end{aligned}$$

adică

$$e^{iS}\left(i\frac{\partial}{\partial t}\right)e^{-iS}\approx\dot{S}+\frac{i}{2}\left[S\,,\,\dot{S}\right]-\frac{1}{6}S\left[S\,,\,\dot{S}\right]+\frac{1}{6}\left[S\,,\,\dot{S}\right]S \tag{8.57}$$

şi, utilizând (8.53), obţinem pentru (8.56) expresia

$$\begin{aligned} H' &\approx H+i\,[S\,,\,H]+\frac{i^2}{2!}\,[S\,,\,[S,H]]+\frac{i^3}{3!}\,[S\,,\,[S\,,\,[S,H]]]+ \\ &+\frac{i^4}{4!}\,[S\,,\,[S\,,\,[S\,,\,[S,H]]]]-\dot{S}-\frac{i}{2}\left[S\,,\,\dot{S}\right]+\frac{1}{6}\left[S\,,\,\left[S,\dot{S}\right]\right], \end{aligned} \tag{8.58}$$

pe care o vom exemplifica în cele ce urmează.

8.3.1 Un caz particular simplu

Considerăm un hamiltonian de forma

$$H=\tau_x B_x+\tau_z B_z \tag{8.59}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi alegem

$$S = \frac{1}{2}\tau_y \theta_0 \tag{8.60}$$

astfel încât operatorul e^{iS} este o rotaţie în jurul axei Oy. În hamiltonianul transformat,

$$H' = B_x\, e^{iS}\tau_x\, e^{-iS} + B_z\, e^{iS}\tau_z\, e^{-iS}\,, \tag{8.61}$$

vom utiliza (8.53) pentru a explicita fiecare termen în parte. Astfel, din relaţia

$$e^{i\frac{1}{2}\tau_y\theta_0}\tau_x e^{-i\frac{1}{2}\tau_y\theta_0} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{i^n\,\theta_0^n}{2^n\,n!}\,[\tau_y\,,\,[\tau_y\,,\ldots[\tau_y\,,\,\tau_x\,\underbrace{]\ldots]]}_{n\text{ ori}} \tag{8.62}$$

avem, pe rând,

$$\begin{aligned}
&\frac{i}{2}\,[\tau_y\,,\,\tau_x] = \frac{i}{2}(-2i\tau_z) = \tau_z\\
&\frac{i^2}{2^2}\,[\tau_y\,,\,[\tau_y\,,\,\tau_x]] = \frac{i}{2}\,[\tau_y\,,\,\tau_z] = -\,\tau_x\\
&\frac{i^3}{2^3}\,[\tau_y\,,\,[\tau_y\,,\,[\tau_y\,,\,\tau_x]]] = -\,\frac{i}{2}\,[\tau_y\,,\,\tau_x] = -\,\tau_z\\
&\frac{i^4}{2^4}\,[\tau_y\,,\,[\tau_y\,,\,[\tau_y\,,\,[\tau_y\,,\,\tau_x]]]] = -\,\frac{i}{2}\,[\tau_y\,,\,\tau_z] = \tau_x\,,
\end{aligned}$$

ciclul repetându-se, şi obţinem

$$\begin{aligned}
&e^{\frac{i}{2}\tau_y\theta_0}\,\tau_x\,e^{-\frac{i}{2}\tau_y\theta_0} =\\
&= \tau_x + \tau_z\theta_0 - \frac{1}{2!}\tau_x\theta_0^2 - \frac{1}{3!}\tau_z\theta_0^3 + \frac{1}{4!}\tau_x\theta_0^4 + \ldots =\\
&= \tau_x\left(1 - \frac{1}{2!}\theta_0^2 + \frac{1}{4!}\theta_0^4 - \ldots\right) + \tau_z\left(\theta_0 - \frac{1}{3!}\theta_0^3 + \frac{1}{5!}\theta_0^5 - \ldots\right),
\end{aligned} \tag{8.63}$$

deci

$$e^{\frac{i}{2}\tau_y\theta_0}\,\tau_x\,e^{-\frac{i}{2}\tau_y\theta_0} = \tau_x\cos\theta_0 + \tau_z\sin\theta_0 \tag{8.64}$$

şi, în mod analog,

$$e^{\frac{i}{2}\tau_y\theta_0}\tau_z e^{-\frac{i}{2}\tau_y\theta_0} = \tau_z\cos\theta_0 - \tau_x\sin\theta_0\,. \tag{8.65}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Cu aceste rezultate, hamiltonianul (8.61) are expresia

$$H' = \tau_x \left(B_x \cos\theta_0 - B_z \sin\theta_0\right) + \tau_z \left(B_x \sin\theta_0 + B_z \cos\theta_0\right), \tag{8.66}$$

în care vom elimina operatorul nediagonal, τ_x, alegându-l pe θ_0 astfel încât să avem

$$B_x \cos\theta_0 - B_z \sin\theta_0 = 0 \;\Rightarrow\; \operatorname{tg}\theta_0 = \frac{B_x}{B_z}, \tag{8.67}$$

adică

$$\cos\theta_0 = \frac{1}{\sqrt{1+\operatorname{tg}^2\theta_0}} = \frac{B_z}{\sqrt{B_x^2+B_z^2}}$$
$$\sin\theta_0 = \frac{B_x}{\sqrt{B_x^2+B_z^2}}\,.$$

Expresia finală a hamiltonianului transformat este acum

$$H' = \sqrt{B_x^2+B_z^2}\,\tau_z\,, \tag{8.68}$$

punând în evidenţă cele două valori proprii, $\pm\sqrt{B_x^2+B_z^2}$.

8.3.2 Particula liberă

În hamiltonianul particulei libere (8.31), cu $c=1$, transformarea Foldy–Wouthuysen trebuie să elimine operatorii impari $\vec{\alpha}$. Inspirându-ne din exemplul precedent, vom considera un operator de forma

$$e^{iS} = e^{\gamma\theta}\,,\ \text{cu}\ \gamma^2 = -1\,, \tag{8.69}$$

deoarece, în acest caz, avem

$$e^{\pm iS} = \cos\theta \pm \gamma \sin\theta\,. \tag{8.70}$$

Pentru a realiza legătura cu hamiltonianul (8.31), vom alege

$$\gamma = \beta\,\frac{\vec{\alpha}\cdot\vec{p}}{p}\,,\ p = |\vec{p}|\,, \tag{8.71}$$

deoarece relaţia

$$(\beta\,\vec{\alpha}\cdot\vec{p})^2 = \beta\,\alpha_1\,\beta\,\alpha_1\,p_x^2 + (\beta\,\alpha_1\,\beta\alpha_2 + \beta\,\alpha_2\,\beta\,\alpha_1)\,p_x\,p_y + \ldots =$$
$$= -\,\beta^2\,\alpha_1^2\,p_x^2 - \beta^2\,(\alpha_1\alpha_2 + \alpha_2\alpha_1)\,p_x p_y + \ldots = -\,\vec{p}^{\,2}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

asigură satisfacerea condiţiei $\gamma^2 = -1$. În consecinţă, vom avea

$$e^{\pm iS} = \cos\theta \pm \frac{\beta\,\vec{\alpha}\cdot\vec{p}}{p}\sin\theta\,, \tag{8.72}$$

care ne conduce la hamiltonianul transformat

$$\begin{aligned}
H' &= \left(\cos\theta + \frac{\beta\,\vec{\alpha}\cdot\vec{p}}{p}\sin\theta\right)(\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m)\left(\cos\theta - \frac{\beta\,\vec{\alpha}\cdot\vec{p}}{p}\sin\theta\right) = \\
&= \left[(\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m)\cos\theta + \left(\beta p - \frac{\vec{\alpha}\cdot\vec{p}}{p}m\right)\sin\theta\right]\times \\
&\times \left(\cos\theta - \frac{\beta\,\vec{\alpha}\cdot\vec{p}}{p}\sin\theta\right) = \\
&= (\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m)\cos^2\theta - (\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m)\sin^2\theta + \\
&+ \left(\beta p - \frac{\vec{\alpha}\cdot\vec{p}}{p}m\right)\sin\theta\cos\theta + \left(\beta p - \frac{\vec{\alpha}\cdot\vec{p}}{p}m\right)\sin\theta\cos\theta = \\
&= (\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m)\cos 2\theta + \left(\beta p - \frac{\vec{\alpha}\cdot\vec{p}}{p}m\right)\sin 2\theta\,,
\end{aligned}$$

adică

$$H' = (\vec{\alpha}\cdot\vec{p})\left(\cos 2\theta - \frac{m}{p}\sin 2\theta\right) + \beta\,(m\cos 2\theta + p\sin 2\theta)\,. \tag{8.73}$$

Ca şi în exemplul anterior, pentru eliminarea operatorilor $\vec{\alpha}$, trebuie să impunem

$$\cos 2\theta - \frac{m}{p}\sin 2\theta = 0 \;\Rightarrow\; \operatorname{tg} 2\theta = \frac{p}{m}\,,$$

adică

$$\cos 2\theta = \frac{m}{\sqrt{p^2+m^2}}\,;\quad \sin 2\theta = \frac{p}{\sqrt{p^2+m^2}}\,.$$

Relaţia (8.73) devine

$$H' = \beta\sqrt{p^2+m^2}\,, \tag{8.74}$$

cu cele două valori proprii, $\pm\sqrt{p^2+m^2}$.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

8.3.3 Cazul general

Din ecuaţia Dirac (8.13), rezultă hamiltonianul

$$H = \vec{\alpha}\cdot(\vec{P}-q\vec{A}) + \beta m + qV \equiv \beta m + \mathcal{E} + \theta\,, \tag{8.75}$$

unde βm şi $\mathcal{E} = qV$ sunt operatori pari, iar

$$\theta = \vec{\alpha}\cdot(\vec{P}-q\vec{A}) \tag{8.76}$$

este operator impar. Alegem

$$S = -i\frac{\beta\theta}{2m}\,, \tag{8.77}$$

şi vom calcula termenii până la θ^4, $\theta^2\mathcal{E}$ şi $\theta\dot{\theta}$. Astfel, omiţând în (8.58) ultimul termen şi explicitând

$$i\,[S,H] = \frac{1}{2m}\,[\beta\theta,\beta m+\mathcal{E}+\theta] =$$

$$= \frac{1}{2}\underbrace{[\beta\theta,\beta]}_{-2\theta} + \frac{1}{2m}\,[\beta\theta,\mathcal{E}] + \frac{1}{2m}\underbrace{[\beta\theta,\theta]}_{2\beta\theta^2} =$$

$$= -\theta + \frac{\beta}{2m}\,[\theta,\mathcal{E}] + \frac{1}{m}\beta\theta^2\,;$$

$$\frac{i^2}{2}\,[S,[S,H]] = \frac{1}{4m}\left\{-\underbrace{[\beta\theta,\theta]}_{2\beta\theta^2} + \frac{1}{2m}\underbrace{[\beta\theta,\beta\,[\theta,\mathcal{E}]]}_{-[\theta,[\theta,\mathcal{E}]]} + \frac{1}{m}\underbrace{\left[\beta\theta,\beta\theta^2\right]}_{-2\theta^3}\right\} =$$

$$= -\frac{1}{2m}\beta\theta^2 - \frac{1}{8m^2}\,[\theta,[\theta,\mathcal{E}]] - \frac{1}{2m^2}\theta^3\,;$$

$$\frac{i^3}{3!}\,[S,[S,[S,H]]] = \frac{1}{6m}\left\{-\frac{1}{2m}\underbrace{\left[\beta\theta,\beta\theta^2\right]}_{-2\theta^3} - \frac{1}{2m^2}\underbrace{\left[\beta\theta,\theta^3\right]}_{2\beta\theta^4}\right\} =$$

$$= \frac{1}{6m^2}\theta^3 - \frac{1}{6m^3}\beta\theta^4\,;$$

$$\frac{i^4}{4!}\,[S,[S,[S,[S,H]]]] = \frac{1}{48m^3}\left[\beta\theta,\theta^3\right] = \frac{1}{24m^3}\beta\theta^4\,;$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$$-\dot{S} = \frac{i}{2m}\beta\dot{\theta}\,;$$
$$-\frac{i}{2}\left[S,\dot{S}\right] = \frac{i}{8m^2}\left[\beta\theta,\beta\dot{\theta}\right] = -\frac{i}{8m^2}\left[\theta,\dot{\theta}\right],$$

avem

$$H' \approx \beta m + \left\{\beta\left(\frac{\theta^2}{2m} - \frac{\theta^4}{8m^3}\right) + \mathcal{E} - \frac{1}{8m^2}\left[\theta,[\theta,\mathcal{E}]\right] - \frac{i}{8m^2}\left[\theta,\dot{\theta}\right]\right\} +$$
$$+ \left\{\frac{\beta}{2m}\left[\theta,\mathcal{E}\right] - \frac{\theta^3}{3m^2} + \frac{i}{2m}\beta\dot{\theta}\right\},$$

adică

$$H' = \beta m + \mathcal{E}' + \theta', \tag{8.78}$$

unde $\mathcal{E}'$ şi θ' sunt, respectiv, specificaţi în cele două acolade. Să observăm că operatorul impar θ' conţine numai termeni cu energia proprie la numitor.

Efectuăm o altă transformare a lui H', cu

$$S' = -\frac{i}{2m}\beta\theta' = -\frac{i}{2m}\beta\left\{\frac{\beta}{2m}\left[\theta,\mathcal{E}\right] - \frac{\theta^3}{3m^2} + \frac{i}{2m}\beta\dot{\theta}\right\}, \tag{8.79}$$

şi calcule asemănătoare cu cele efectuate ne conduc la

$$H'' = \beta m + \mathcal{E}' + \left\{\frac{\beta}{2m}\left[\theta',\mathcal{E}'\right] + \frac{i}{2m}\beta\ddot{\theta}\right\}. \tag{8.80}$$

A treia transformare, cu

$$S'' = -\frac{i\beta}{2m}\theta'', \tag{8.81}$$

conduce la

$$H''' = \beta m + \mathcal{E}' + \mathcal{O}(1/m^3), \tag{8.82}$$

unde

$$\mathcal{E}' = \beta\left(\frac{\theta^2}{2m} - \frac{\theta^4}{8m^3}\right) + \mathcal{E} - \frac{1}{8m^2}\left[\theta,[\theta,\mathcal{E}]\right] - \frac{i}{8m^2}\left[\theta,\dot{\theta}\right]. \tag{8.83}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Evaluând, pe rând, termenii lui $\mathcal{E}'$, adică

$$\frac{\theta^2}{2m} = \frac{1}{2m}\left[\vec{\alpha}\cdot(\vec{P}-q\vec{A})\right]^2 = \frac{1}{2m}(\vec{P}-q\vec{A})^2 - \frac{q}{2m}\vec{\tau}\cdot\vec{B}\,;$$

$$-\frac{\theta^4}{8m^3} = -\frac{\vec{P}^4}{8m^3}\,;$$

$$-\frac{1}{8m^2}\left\{[\theta,[\theta,\mathcal{E}]] + i\left[\theta,\dot{\theta}\right]\right\} = -\frac{1}{8m^2}\left[\theta,\left([\theta,\mathcal{E}]+i\dot{\theta}\right)\right] =$$

$$= -\frac{1}{8m^2}\left[\theta,\left(-iq\vec{\alpha}\cdot\nabla V - iq\vec{\alpha}\cdot\dot{\vec{A}}\right)\right] =$$

$$= -\frac{iq}{8m^2}\left[\vec{\alpha}\cdot(\vec{P}-q\vec{A}),\,\vec{\alpha}\cdot\vec{E}\right] \approx -\frac{iq}{8m^2}\left[\vec{\alpha}\cdot\vec{P},\,\vec{\alpha}\cdot\vec{E}\right] =$$

$$= -\frac{q}{8m^2}\nabla\cdot\vec{E} + \frac{iq}{8m^2}\vec{\tau}\cdot(\nabla\times\vec{E}) + \frac{q^2}{4m^2}\vec{\tau}\cdot(\vec{E}\times\vec{P})\,,$$

obţinem

$$H''' = \underbrace{\beta\left[m + \frac{(\vec{P}-q\vec{A})^2}{2m} - \frac{P^4}{8m^4}\right]}_{(1)} + \underbrace{qV}_{(2)} - \underbrace{\frac{q}{2m}\beta\vec{\tau}\cdot\vec{B}}_{(3)} +$$

$$+ \underbrace{\left[-\frac{iq}{8m^2}\vec{\tau}\cdot(\nabla\times\vec{E}) - \frac{q}{4m^2}\vec{\tau}\cdot(\vec{E}\times\vec{P})\right]}_{(4)} - \underbrace{\frac{q}{8m^2}\nabla\cdot\vec{E}}_{(5)}\,. \tag{8.84}$$

Cei cinci termeni distincţi, din membrul drept, numerotaţi de la stânga la dreapta, au respectiv semnificaţiile:

(1) provine din dezvoltarea în serie a lui $\sqrt{(\vec{P}-q\vec{A})^2+m^2}$,

(2) este energia electrostatică,

(3) este energia dipolului magnetic,

(4) este energia spin–orbită. Într-adevăr, presupunând o simetrie sferică, adică $V = V(r)$ şi $\vec{A} = 0$, atunci $\nabla\times\vec{E} = 0$ şi avem

$$-\frac{q}{4m^2}\vec{\tau}\cdot(\vec{E}\times\vec{p}) = -\frac{q}{4m^2}\vec{\tau}\cdot\left(-\frac{dV}{dr}\frac{\vec{r}}{r}\times\vec{p}\right) = \frac{q}{4m^2r}\frac{dV}{dr}\vec{\tau}\cdot(\vec{r}\times\vec{p})\,,$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

respectiv

$$H_{spin-orbita} = \frac{q}{4m^2 r}\frac{dV}{dr}\vec{\tau}\cdot\vec{L}.$$

(5) este termenul Darwin, interpretat ca energie datorată unei mişcări de "tremurici" (Zitterbewegung) a electronului în jurul poziţiei de echilibru [3].

8.4 Formularea Lorentz-covariantă a ecuaţiei lui Dirac

Deoarece este mai elegant să utilizăm o metrică hiperbolică de signatură +2, pentru a fi în acord complet cu structura spaţio-temporală în Relativitatea Generală [12, 23, 48], vom considera tensorul metric fundamental de forma

$$\eta^{ik} = \mathrm{diag}[1, 1, 1, -1].$$

După cum am prezentat anterior, ecuaţia lui Dirac se obţine prin liniarizarea relaţiei lui Einstein $p^2 + m^2 = 0$, în care p este 4-vectorul impuls

$$(p^i)_{i=\overline{1,4}} = \left((p^\mu)_{\mu=\overline{1,3}}, p^4 = E\right),$$

iar m este masa de repaus a electronului. În cazul electronului liber, ecuaţia lui Dirac (8.20), în unităţi naturale, se scrie

$$(\vec{\alpha}\cdot\vec{p} + \beta m - E)|\psi\rangle = 0, \tag{8.85}$$

unde $(\alpha^\mu) = (\alpha^1, \alpha^2, \alpha^3)$ şi β sunt matricele lui Dirac (8.12), iar $\vec{p}$ şi E sunt, respectiv, operatorii uzuali de impuls şi energie, adică

$$p_i = -i\,\partial_i\,,\ i = \overline{1,4}.$$

Inspectând (8.85), observăm că aceasta se mai poate scrie şi sub forma

$$(\alpha^\mu p_\mu + 1\cdot(-E) + \beta m)\,|\psi\rangle = 0\,, \tag{8.86}$$

din care, dacă notăm $\alpha^4 = 1$ (matricea unitate 4×4) şi avem în vedere că $p_4 = -E$, rezultă

$$\left(\alpha^\mu p_\mu + \alpha^4 p_4 + \beta m\right)|\psi\rangle = 0\,. \tag{8.87}$$

BCU "SI" CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Analizând această ecuaţie, se vede că, aşa cum $(\vec{p}, E)$ sunt componentele cuadrivectorului impuls $(p^i)_{i=\overline{1,4}}$, tot aşa $(\vec{\alpha}, 1)$ pot fi considerate drept componente ale unui cuadrivector matriceal, anume

$$(\alpha^i)_{i=\overline{1,4}} = \left((\alpha^\mu)_{\mu=\overline{1,3}}, 1\right).$$

Atunci, (8.87) devine

$$\left(\alpha^i p_i + \beta m\right)|\psi\rangle = 0 \tag{8.88}$$

şi, înmulţind la stânga cu $-i\beta$, rezultă ecuaţia

$$\left(\gamma^i p_i - im\right)|\psi\rangle = 0, \tag{8.89}$$

unde am introdus *matricele von Neumann*

$$\gamma^\mu = \gamma_\mu = -i\beta\alpha^\mu \; ; \; \gamma^4 = -\gamma_4 = -i\beta \, . \tag{8.90}$$

Convenim ca, ori de câte ori avem un cuadrivector contractat cu matricele von Neumann $(\gamma^i)_{\overline{1,4}}$, să utilizăm simbolul circomflex deasupra 4-vectorului respectiv, adică, de exemplu,

$$\hat{p} = \gamma^i p_i \, , \tag{8.91}$$

evident, cu sumare după i de la 1 la 4.

Aşadar, ecuaţia lui Dirac (8.89) se poate scrie condensat

$$(\hat{p} - im)|\psi\rangle = 0 \, . \tag{8.92}$$

Cum, însă, $p_i = -i\partial_i$, rezultă

$$\hat{p} = -i\gamma^i\partial_i = -i\hat{\partial},$$

astfel încât ecuaţia (8.92) ia forma concret utilizată în practica de calcul

$$(\hat{\partial} + m)|\psi\rangle = 0 \, , \quad \text{cu } \hat{\partial} = \gamma^i\partial_i = \gamma^i \frac{\partial}{\partial x^i} \, . \tag{8.93}$$

Să stabilim două proprietăţi esenţiale ale matricelor γ.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

1. Acestea satisfac relaţiile de anticomutare

$$\gamma_i\gamma_k + \gamma_k\gamma_i = 2\eta_{ik}\,. \tag{8.94}$$

Demonstraţie
Pe partea spaţială $i = \mu$, $k = \nu$, avem

$$\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = (-i\beta\alpha_\mu)(-i\beta\alpha_\nu) + (-i\beta\alpha_\nu)(-i\beta\alpha_\mu) = \\ = -\left[\beta\left(\alpha_\mu\beta\alpha_\nu + \alpha_\nu\beta\alpha_\mu\right)\right] = +\beta^2\alpha_{(\mu}\alpha_{\nu)} = \alpha_{(\mu}\alpha_{\nu)}\,,$$

adică

$$\gamma_\mu\gamma_\nu + \gamma_\nu\gamma_\mu = \alpha_\mu\alpha_\nu + \alpha_\nu\alpha_\mu = 2\delta_{\mu\nu}\,, \tag{8.95}$$

unde am utilizat notaţia $\alpha_{(\mu}\alpha_{\nu)} \equiv \alpha_\mu\alpha_\nu + \alpha_\nu\alpha_\mu$.
Pe partea spaţio-temporală $i = \mu$, $k = 4$, avem

$$\gamma_\mu\gamma_4 + \gamma_4\gamma_\mu = -i\beta\alpha_\mu(i\beta) + (i\beta)(-i\beta\alpha_\mu) = -\alpha_\mu + \alpha_\mu \equiv 0\,, \tag{8.96}$$

iar pe partea temporală, $i = k = 4$, rezultă imediat

$$\gamma_4\gamma_4 + \gamma_4\gamma_4 = 2\gamma_4\gamma_4 = -2\beta^2 = -2\,,$$

adică

$$\gamma_4\gamma_4 + \gamma_4\gamma_4 = 2\eta_{44}\,. \tag{8.97}$$

q.e.d.

2. În această reprezentare a tensorului fundamental η, matricele von Neumann $\gamma^\mu = \gamma_\mu$ sunt hermitice, iar $\gamma^4 = -\gamma_4$ este antihermitică, adică

$$(\gamma^\mu)^\dagger = \gamma^\mu\,,\quad \left(\gamma^4\right)^\dagger = -\gamma^4\,, \tag{8.98}$$

ceea ce se constantă imediat din (8.12) şi (8.90).

Bazându-ne pe ecuaţia Dirac (8.93), să trecem acum la obţinerea aşa-numitei *ecuaţii adjuncte a lui Dirac.* Din (8.93), adică

$$\left(\gamma^\mu\partial_\mu + \gamma^4\partial_4 + m\right)\psi = 0\,, \tag{8.99}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

prin conjugare hermitică,

$$\psi^\dagger \left(\partial_\mu \gamma^\mu - \partial_4 \gamma^4 + m\right) = 0\,, \tag{8.100}$$

şi înmulţire, la dreapta, cu β, obţinem

$$\left(\partial_\mu \psi^\dagger\right) \gamma^\mu \beta - \left(\partial_4 \psi^\dagger\right) \gamma^4 \beta + \psi^\dagger \beta m = 0\,,$$

adică

$$\partial_\mu \left(\psi^\dagger \beta\right) \gamma^\mu + \partial_4 \left(\psi^\dagger \beta\right) \gamma^4 - \left(\psi^\dagger \beta\right) m = 0\,, \tag{8.101}$$

dat fiind că $\gamma^\mu \beta = -\beta \gamma^\mu$ şi $\gamma^4 \beta = \beta \gamma^4$. Definind prin

$$\bar{\psi} = \psi^\dagger \beta \tag{8.102}$$

conjugata Dirac a stării (bispinoriale) ψ, ecuaţia (8.101) se scrie

$$\bar{\psi}(\gamma^i \partial_i - m) = 0\,, \tag{8.103}$$

unde operatorul din dreapta acţionează la stânga, rezultând astfel, în scriere condensată, *ecuaţia Dirac adjunctă*

$$\bar{\psi}(\hat{\partial} - m) = 0\,. \tag{8.104}$$

În cele ce urmează, vom stabili o serie de proprietăţi algebrice ale matricelor γ. În primul rând, prin definiţie, se introduce matricea hermitică

$$\gamma_5 = -i\gamma^1\gamma^2\gamma^3\gamma^4 = \frac{i}{4!}\,\varepsilon_{ijkl}\,\gamma^i\gamma^j\gamma^k\gamma^l\,, \tag{8.105}$$

unde ε_{ijkl} este tensorul complet antisimetric, cu $\varepsilon_{1234} = -1$, care anticomută cu oricare dintre matricele γ^i. Într-adevăr, avem, de exemplu,

$$\gamma_5\gamma^1 = -i\gamma^1\gamma^2\gamma^3\gamma^4\gamma^1 = \gamma^1\, i\gamma^1\gamma^2\gamma^3\gamma^4 = -\gamma^1\gamma^5 \text{ etc.}$$

Observăm, de asemenea, că

$$(\gamma_5)^2 = -\gamma^1\gamma^2\gamma^3\gamma^4\gamma^1\gamma^2\gamma^3\gamma^4 = \gamma^1\gamma^2\gamma^3\gamma^1\gamma^2\gamma^3\eta^{44} = 1\,. \tag{8.106}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

În al doilea rând, folosind regula fundamentală (8.94) de anticomutare a matricelor von Neumann, se pot demonstra următoarele rezultate importante:

$$\begin{aligned}
&\text{a)}\quad \gamma^i\gamma_i = 4\\
&\text{b)}\quad \gamma^i\hat{a}\gamma_i = -2\hat{a}\\
&\text{c)}\quad \gamma^i\hat{a}\hat{b}\gamma_i = 4a\cdot b\\
&\text{d)}\quad \gamma^i\hat{a}\hat{b}\hat{c}\gamma_i = -2\hat{c}\hat{b}\hat{a}\\
&\text{e)}\quad \hat{a}\hat{b} = -\hat{b}\hat{a} + 2a\cdot b\\
&\text{f)}\quad \gamma_i\gamma_5 = \frac{i}{3!}\varepsilon_{ijkl}\gamma^j\gamma^k\gamma^l\\
&\text{g)}\quad \gamma^i\gamma^j\gamma^k = \eta^{ij}\gamma^k - \eta^{ik}\gamma^j + \eta^{jk}\gamma^i + i\gamma_5\varepsilon^{ijkl}\gamma_l\,.
\end{aligned} \tag{8.107}$$

În continuare, vom utiliza noţiunea de trasă (urmă) a unei matrice, definită ca

$$\mathrm{Tr}A = \sum_i A_{ii} = A^i{}_i\,. \tag{8.108}$$

Cum trasa unui produs de matrice nu se modifică dacă are loc o permutare circulară a acestora, deoarece

$$\mathrm{Tr}AB\ldots XZ = A_{ij}B_{jk}\ldots X_{ls}Z_{si} = Z_{si}A_{ij}B_{jk}\ldots X_{ls} = \mathrm{Tr}ZAB\ldots X\,, \tag{8.109}$$

unde am subînţeles sumare după toţi indicii, rezultă imediat că trasa unei matrice este invariantă faţă de o transformare matriceală de tipul

$$A' = SAS^{-1}\,, \tag{8.110}$$

deoarece

$$\mathrm{Tr}A' = \mathrm{Tr}\,SAS^{-1} = \mathrm{Tr}\,S^{-1}SA = \mathrm{Tr}A\,. \tag{8.111}$$

Dacă S este o matrice unitară, adică $S^\dagger = S^{-1}$, atunci transformarea (8.110) poartă numele de transformare unitară.

Trasa unui produs format dintr-un număr impar de matrice γ este întotdeauna zero. Aceasta rezultă folosind un artificiu şi bazându-ne pe proprietatea (8.109) şi pe relaţia de anticomutare a matricei γ_5 cu γ^i, adică

$$\{\gamma_5, \gamma^i\} = 0\,. \tag{8.112}$$

BUCUREŞTI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Astfel, putem scrie

$$\mathrm{Tr}\,\gamma_{k_1}\gamma_{k_2}\ldots\gamma_{k_n} \overset{(8.106)}{=} \mathrm{Tr}\,\gamma_5\gamma_5\gamma_{k_1}\gamma_{k_2}\ldots\gamma_{k_n} \overset{(8.112)}{=}$$
$$= (-1)^n\,\mathrm{Tr}\,\gamma_5\gamma_{k_1}\gamma_{k_2}\ldots\gamma_{k_n}\gamma_5 = (-1)^n\,\mathrm{Tr}\,\gamma_{k_1}\gamma_{k_2}\ldots\gamma_{k_n}$$

de unde, pentru n impar, rezultă că

$$\mathrm{Tr}\,\gamma_{k_1}\gamma_{k_2}\ldots\gamma_{k_n} = 0\,. \tag{8.113}$$

În consecinţă, sunt valabile relaţiile

$$\mathrm{Tr}\,\gamma_k = 0\,,\ \mathrm{Tr}\,[\gamma_k\gamma_l\gamma_n] = 0\,. \tag{8.114}$$

Să adăugăm acum o regulă generală de recurenţă pentru calcularea trasei unui produs format dintr-un număr par de matrice γ. Folosind proprietatea (8.94), avem succesiv:

$$\mathrm{Tr}\,\gamma^{k_1}\gamma^{k_2}\ldots\gamma^{k_{2n}} = \mathrm{Tr}\left(2\eta^{k_1k_2} - \gamma^{k_2}\gamma^{k_1}\right)\gamma^{k_3}\ldots\gamma^{k_{2n}} =$$
$$= 2\eta^{k_1k_2}\,\mathrm{Tr}\,\gamma^{k_3}\ldots\gamma^{k_{2n}} - \mathrm{Tr}\,\gamma^{k_2}\gamma^{k_1}\gamma^{k_3}\ldots\gamma^{k_{2n}} =$$
$$= 2\eta^{k_1k_2}\,\mathrm{Tr}\,\gamma^{k_3}\ldots\gamma^{k_{2n}} - \mathrm{Tr}\,\gamma^{k_2}\left(2\eta^{k_1k_3} - \gamma^{k_3}\gamma^{k_1}\right)\gamma^{k_4}\ldots\gamma^{k_{2n}} =$$
$$= \ldots = 2\eta^{k_1k_2}\,\mathrm{Tr}\,\gamma^{k_3}\ldots\gamma^{k_{2n}} - 2\eta^{k_1k_3}\,\mathrm{Tr}\,\gamma^{k_2}\gamma^{k_4}\ldots\gamma^{k_{2n}} +$$
$$+ 2\eta^{k_1k_4}\,\mathrm{Tr}\,\gamma^{k_2}\gamma^{k_3}\gamma^{k_5}\ldots\gamma^{k_{2n}} - \ldots + \mathrm{Tr}\,\gamma^{k_2}\ldots\gamma^{k_{2n-1}}\gamma^{k_1}\gamma^{k_{2n}}\,.$$

Dacă, în ultimul termen, înlocuim $\gamma^{k_1}\gamma^{k_{2n}} = 2\eta^{k_1k_{2n}} - \gamma^{k_{2n}}\gamma^{k_1}$, mai putem scrie

$$\mathrm{Tr}\,\gamma^{k_1}\ldots\gamma^{k_{2n}} = 2\sum_r(-1)^r\,\eta^{k_1k_r}\,\mathrm{Tr}\,\gamma^{k_2}\ldots\gamma^{k_{r-1}}\gamma^{k_{r+1}}\ldots\gamma^{k_{2n}} -$$
$$- \mathrm{Tr}\,\gamma^{k_1}\gamma^{k_2}\ldots\gamma^{k_{2n}}\,,$$

de unde obţinem, în sfârşit,

$$\mathrm{Tr}\,\gamma^{k_1}\ldots\gamma^{k_{2n}} = \sum_r(-1)^r\,\eta^{k_1k_r}\,\mathrm{Tr}\,\gamma^{k_2}\gamma^{k_3}\ldots\gamma^{k_{r-1}}\gamma^{k_{r+1}}\ldots\gamma^{k_{2n}}\,. \tag{8.115}$$

Avantajul acestei reguli constă în faptul că reduce numărul matricelor γ de sub semnul trasei cu două unităţi. De exemplu, trasa a două matrice γ este

$$\mathrm{Tr}\left[\gamma^k\gamma^j\right] = \eta^{kj}\,\mathrm{Tr}\,1 = 4\eta^{kj}\,, \tag{8.116}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

iar în cazul a patru matrice γ, rezultă imediat că

$$\mathrm{Tr}\left[\gamma^k\gamma^j\gamma^m\gamma^p\right] = 4\left(\eta^{kj}\eta^{mp} - \eta^{km}\eta^{jp} + \eta^{kp}\eta^{jm}\right). \tag{8.117}$$

Ultimele două relaţii conduc la următoarele teoreme de trasă

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{a}\,\hat{b}\right] = 4\,a\cdot b \tag{8.118}$$

$$\mathrm{Tr}\left[\hat{a}\,\hat{b}\,\hat{c}\,\hat{d}\right] = 4\left[(a\cdot b)\,(c\cdot d) - (a\cdot c)\,(b\cdot d) + (a\cdot d)\,(b\cdot c)\right], \tag{8.119}$$

a căror demonstraţie este imediată.

În acelaşi timp, deosebit de utilizate în studiul cuantic al interacţiunii câmpurilor fermionice sunt şi următoarele teoreme de trasă, implicând matricea γ_5

$$\begin{aligned}
&\text{a)}\quad \mathrm{Tr}\left[\gamma_5\hat{a}\right] = 0\\
&\text{b)}\quad \mathrm{Tr}\left[\gamma_5\hat{a}\,\hat{b}\right] = 0\\
&\text{c)}\quad \mathrm{Tr}\left[\gamma_5\hat{a}\,\hat{b}\,\hat{c}\right] = 0\\
&\text{d)}\quad \mathrm{Tr}\left[\gamma_5\hat{a}\,\hat{b}\,\hat{c}\,\hat{d}\right] = 4\,i\,\varepsilon_{ijkl}\,a^i b^j c^k d^l\,.
\end{aligned} \tag{8.120}$$

Demonstraţie

Primele trei relaţii fiind evidente (deşi (8.120.b) reclamă puţin mai multă atenţie), vom demonstra identitatea (8.120.d). Din (8.107.g), prin înmulţire la dreapta cu γ^m şi apoi la stânga cu γ_5, avem

$$\gamma_5\gamma^i\gamma^j\gamma^k\gamma^m = \eta^{ij}\,\gamma_5\gamma^k\gamma^m - \eta^{ik}\,\gamma_5\gamma^j\gamma^m + \eta^{jk}\gamma_5\gamma^i\gamma^m + i\,\varepsilon^{ijkl}\gamma_l\gamma^m\,,$$

expresie a cărei trasă devine

$$\mathrm{Tr}\left[\gamma_5\gamma^i\gamma^j\gamma^k\gamma^m\right] = i\,\varepsilon^{ijkl}\,\mathrm{Tr}\left[\gamma_l\gamma^m\right] = 4\,i\,\varepsilon^{ijkm}\,,$$

rezultând imediat (8.120.d), prin "contracţie" cu $a_i b_j c_k d_m$.

q.e.d.

BCU IAŞI / CENTRALA UNIVERSITY LIBRARY

8.5 Formalismul lagrangeian

Pentru a construi densitatea de lagrangeian a câmpului spinorial liber, se pleacă de la observaţia că, prin multiplicarea cu $\bar{\psi}$ la stânga ecuaţiei Dirac (8.93), rezultă funcţia

$$\mathcal{L}_{(1)}\left[\bar{\psi},\,\psi\right] = \bar{\psi}\left[\left(\hat{\partial} + m\right)\psi\right], \tag{8.121}$$

cu $\mathcal{L}_{(1)}\left[\bar{\psi},\,\psi\right] = 0$, atunci când ψ este *on-shell*[1], adică $p^2 + m^2 = 0$.

După cum se poate constata uşor, interpretând $\mathcal{L}_{(1)}\left[\bar{\psi},\,\psi\right]$ ca o densitate de lagrangeian, ecuaţiile Euler–Lagrange conduc atât la ecuaţia Dirac, cât şi la adjuncta acesteia. Într-adevăr,

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad \frac{\partial\mathcal{L}_{(1)}}{\partial\psi_{,i}} = \bar{\psi}\gamma^i \;;\; \frac{\partial\mathcal{L}_{(1)}}{\partial\psi} = m\bar{\psi} \\ &\text{b)}\quad \frac{\partial\mathcal{L}_{(1)}}{\partial\bar{\psi}_{,i}} = 0 \;;\; \frac{\partial\mathcal{L}_{(1)}}{\partial\bar{\psi}} = \gamma^i\psi_{,i} + m\psi\,, \end{aligned} \tag{8.122}$$

deci ecuaţiile Euler–Lagrange se scriu

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad \frac{\partial}{\partial x^i}\left[\frac{\partial\mathcal{L}_{(1)}}{\partial\psi_{,i}}\right] - \frac{\partial\mathcal{L}_{(1)}}{\partial\psi} = 0 \;\Leftrightarrow\; \bar{\psi}_{,i}\,\gamma^i - m\bar{\psi} = 0\,, \\ &\text{b)}\quad \frac{\partial}{\partial x^i}\left[\frac{\partial\mathcal{L}_{(1)}}{\partial\bar{\psi}_{,i}}\right] - \frac{\partial\mathcal{L}_{(1)}}{\partial\bar{\psi}} = 0 \;\Leftrightarrow\; \gamma^i\psi_{,i} + m\psi = 0\,, \end{aligned} \tag{8.123}$$

oferindu-ne "adjuncta" şi, respectiv, ecuaţia lui Dirac. Din punct de vedere tehnic, problema cu densitatea de lagrangeian $\mathcal{L}_{(1)}$ este aceea că aceasta este asimetrică în raport cu derivatele funcţiilor de câmp ψ, $\bar{\psi}$. Pentru a depăşi această dificultate, se observă că densitatea de lagrangeian $\mathcal{L}_{(1)}\left[\bar{\psi},\psi\right]$ nu este invariantă la acţiunea operaţiei de conjugare hermitică, dat fiind că

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{\dagger}_{(1)}\left[\bar{\psi},\psi\right] &= \left(\gamma^\mu\psi_{,\mu} + \gamma^4\psi_{,4} + m\psi\right)^{\dagger}\left(\psi^{\dagger}\beta\right)^{\dagger} = \\ &= \left(\psi^{\dagger}{}_{,\mu}\,\gamma^\mu - \psi^{\dagger}{}_{,4}\,\gamma^4 + m\psi^{\dagger}\right)\beta\psi = \\ &= \left[-\left(\psi^{\dagger}\beta\right)_{,\mu}\gamma^\mu - \left(\psi^{\dagger}\beta\right)_{,4}\gamma^4 + m\left(\psi^{\dagger}\beta\right)\right]\psi\,, \end{aligned}$$

adică obţinem în loc de $\mathcal{L}_1$, densitatea de lagrangeian

$$\mathcal{L}_{(2)}\left[\bar{\psi},\,\psi\right] = \mathcal{L}^{\dagger}_{(1)}\left[\bar{\psi},\,\psi\right] = -\left[\bar{\psi}\left(\hat{\partial} - m\right)\right]\psi\,, \tag{8.124}$$

[1] pe pătură

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

cu operatorul $\left(\hat{\partial} - m\right)$, acţionând la stânga.

Din punct de vedere dinamic, la nivel semiclasic, densitatea de lagrangeian $\mathcal{L}_{(2)}\left[\bar{\psi}, \psi\right]$ este echivalentă cu $\mathcal{L}_{(1)}\left[\bar{\psi}, \psi\right]$, dat fiind că diferă de aceasta numai printr-o cuadridivergenţă care, dacă cele două câmpuri sunt *on-shell*, se anulează, exprimând legea de conservare a cuadricurentului câmpului Dirac. Într-adevăr, avem

$$\mathcal{L}_{(1)}\left[\bar{\psi}, \psi\right] - \mathcal{L}_{(2)}\left[\bar{\psi}, \psi\right] = \bar{\psi}\left(\gamma^i \psi_{,i} + m\psi\right) + \left(\bar{\psi}_{,i}\gamma^i - m\bar{\psi}\right)\psi = \left(\bar{\psi}\gamma^i\psi\right)_{,i}, \tag{8.125}$$

iar în cazul când $\bar{\psi}$, ψ satisfac respectiv ecuaţiile (8.123.a, b), rezultă, fără dificultăţi, că

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad \bar{\psi}_{,i}\gamma^i\psi = m\bar{\psi}\psi \\ &\text{b)} \quad \bar{\psi}\gamma^i\psi_{,i} = -m\bar{\psi}\psi, \end{aligned} \tag{8.126}$$

adică, prin sumare membru cu membru, $\left(\bar{\psi}\gamma^i\psi\right)_{,i} = 0$ *on-shell*. Având $\mathcal{L}_{(1)}$ şi $\mathcal{L}_{(2)}$, precum şi echivalenţa dinamică a acestora, în baza căreia orice combinaţie liniară cu coeficienţi constanţi a celor doi lagrangeieni conduce tot la o funcţie Lagrange, "simetria" în raport cu prezenţa derivatelor câmpurilor $\bar{\psi}$, ψ, în densitatea de lagrangeian a câmpului spinorial, se instaurează imediat, dacă impunem simplu condiţia de invarianţă a *lagrangeianului complet* la acţiunea conjugării hermitice, adică dacă lucrăm cu lagrangeianul

$$\mathcal{L}\left[\bar{\psi}, \psi\right] = \frac{1}{2}\left[\mathcal{L}_{(1)} + \mathcal{L}_{(2)}\right] = \frac{1}{2}\left[\bar{\psi}\gamma^i\psi_{,i} - \bar{\psi}_{,i}\gamma^i\psi\right] + m\bar{\psi}\psi\,. \tag{8.127}$$

Evident, dat fiind că, *on-shell*, $\mathcal{L}_{(1)} = \mathcal{L}_{(2)} = 0$, funcţia Lagrange $\mathcal{L}$ se va anula, de asemenea.

8.6 Sistemul fundamental de soluţii

Aplicăm ecuaţiei Dirac (8.93), la stânga, operatorul matriceal şi diferenţial $\hat{\partial} = \gamma^k\partial_k$ şi avem

$$\hat{\partial}\left(\hat{\partial}\psi\right) + m\,\hat{\partial}\psi = 0 \;\Rightarrow\; \gamma^k\gamma^i\psi_{,ik} - m^2\psi = 0\,, \tag{8.128}$$

unde, în ultimul termen, am utilizat relaţia (8.93). Din algebra matricelor Dirac şi din comutarea derivatelor parţiale $\psi_{,ik} = \psi_{,ki}$, rezultă că numai partea

PCUNS / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

simetrică a produsului $\gamma^k\gamma^i$ contribuie la primul termen. Astfel, obţinem

$$\gamma^k\gamma^i\psi_{,ik} - m^2\,\psi = 0 \;\Leftrightarrow\; \frac{1}{2}\left(\gamma^k\gamma^i + \gamma^i\gamma^k\right)\psi_{,ik} - m^2\,\psi = 0$$
$$\Leftrightarrow\; \eta^{ik}\psi_{,ik} - m^2\,\psi = 0\,, \tag{8.129}$$

adică ajungem la o ecuaţie de tip Gordon

$$\Box\psi - m^2\,\psi = 0\,, \tag{8.130}$$

drept condiţie necesară, dar nu şi suficientă, pe care trebuie să o satisfacă funcţia bispinorială de stare $\psi : \mathbf{R}^4 \to \mathbf{C}^4$, pentru a fi o soluţie a ecuaţiei Dirac (8.93). Procedând analog în cazul ecuaţiei adjuncte a lui Dirac, adică "înmulţind" la dreapta cu $\hat{\partial}$ (care acţionează, în acest caz, numai la stânga), rezultă exact acelaşi tip de ecuaţie, adică conjugata Dirac a ecuaţiei (8.130) şi anume

$$\Box\bar{\psi} - m^2\bar{\psi} = 0\,, \tag{8.131}$$

pentru conjugata Dirac a funcţiei de stare ψ.

Sub aspectul dependenţei spaţio-temporale $\mathbf{R}^4$ a stărilor ψ, $\bar{\psi}$, ecuaţiile (8.130) şi (8.131) ne spun că soluţiile ecuaţiei Dirac (8.93) şi ale adjunctei acesteia, (8.104), trebuie să fie de forma

$$\text{a)}\quad \psi(x) = \int d^3p\,\left[C_+(\vec{p})f_{\vec{p}}(x) + C_-(\vec{p})\bar{f}_{\vec{p}}(x)\right]$$
$$\text{b)}\quad \bar{\psi}(x) = \int d^3p\,\left[\bar{C}_-(\vec{p})f_{\vec{p}}(x) + \bar{C}_+(\vec{p})\bar{f}_{\vec{p}}(x)\right], \tag{8.132}$$

unde sistemul de matrice $\{C_+(\vec{p}),\, C_-(\vec{p}),\, \bar{C}_-(\vec{p}),\, \bar{C}_+(\vec{p})\}$ este, deocamdată, nedeterminat. Funcţia $\bar{f}_{\vec{p}}(x)$ este conjugata complexă a funcţiei $f_{\vec{p}}(x)$, iar aceasta din urmă este soluţia fundamentală de frecvenţă pozitivă şi impuls $\vec{p}$ a ecuaţiei Gordon

$$\Box f_{\vec{p}}(x) - m^2 f_{\vec{p}}(x) = 0\,. \tag{8.133}$$

Prin comparare cu modurile de frecvenţă ale câmpului scalar, este evident că avem de-a face cu aceleaşi moduri de frecvenţă,

$$\text{a)}\quad f_{\vec{p}}(x) = \frac{(2\pi)^{-3/2}}{\sqrt{2E_p}}\,e^{ipx}\,,\ \text{pentru frecvenţele pozitive,}$$
$$\text{b)}\quad \bar{f}_{\vec{p}}(x) = \frac{(2\pi)^{-3/2}}{\sqrt{2E_p}}\,e^{-ipx}\,,\ \text{pentru frecvenţele negative,} \tag{8.134}$$

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

cu $E_p = +\sqrt{|\vec{p}|^2 + m^2} = p^4$ (altfel spus, componenta a patra a cuadriimpulsului este întotdeauna pozitivă), care satisfac relaţia de ortonormare generalizată

$$i \int [\bar{f}_{\vec{p}'}(x) f_{\vec{p},4}(x) - \bar{f}_{\vec{p}',4}(x) f_{\vec{p}}(x)]\, d^3x = \delta(\vec{p}' - \vec{p}) \,, \tag{8.135}$$

unde $(\cdot)_{,4} = (\cdot)_{,t} = \partial_t(\cdot)$. Bineînţeles, matricele $\bar{C}_{\mp}(\vec{p})$ sunt conjugatele Dirac ale matricelor $C_{\mp}(\vec{p})$, adică

$$\bar{C}_{\mp}(\vec{p}) = C^{\dagger}_{\mp}(\vec{p})\beta \,.$$

Odată clarificate aceste lucruri, să trecem la "problema suficienţei" expresiilor (8.132) adică la determinarea matricelor $C_{\pm}(\vec{p})$ care fac din $\psi(x)$, în mod explicit, o soluţie a ecuaţiei Dirac (8.93). Desigur, dacă acest lucru se va întâmpla, atunci şi $\bar{\psi} = \psi^{\dagger}\beta$ va fi (automat) o soluţie (exactă) a ecuaţiei adjuncte (8.104). Prin urmare, este suficient să ne concentrăm asupra ecuaţiei

$$\begin{aligned} &\gamma^i \partial_i \left\{ \int d^3p \, [C_+(\vec{p}) f_{\vec{p}}(x) + C_-(\vec{p}) \bar{f}_{\vec{p}}(x)] \right\} + \\ &+ m \int d^3p \, [C_+(\vec{p}) f_{\vec{p}}(x) + C_-(\vec{p}) \bar{f}_{\vec{p}}(x)] = 0. \end{aligned} \tag{8.136}$$

Cum, din (8.134), rezultă că

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad \partial_i f_{\vec{p}}(x) = f_{\vec{p},i}(x) = ip_i \, f_{\vec{p}}(x) \\ &\text{b)} \quad \partial_i \bar{f}_{\vec{p}}(x) = \bar{f}_{\vec{p},i}(x) = -ip_i \, \bar{f}_{\vec{p}}(x) \,, \end{aligned} \tag{8.137}$$

iar modurile $f_{\vec{p}}(x)$, $\bar{f}_{\vec{p}}(x)$ sunt liniar independente, ecuaţia (8.136) se separă după părţile ei de frecvenţă pozitivă, respectiv negativă, adică obţinem sistemul (decuplat)

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad +i \int d^3p \, [(\hat{p} - im) C_+(\vec{p})] \, f_{\vec{p}}(x) = 0 \,, \\ &\text{b)} \quad -i \int d^3p \, [(\hat{p} + im) C_-(\vec{p})] \, \bar{f}_{\vec{p}}(x) = 0 \,, \end{aligned} \tag{8.138}$$

din care rezultă ecuaţiile matriceale

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad (\hat{p} - im) C_+(\vec{p}) = 0 \,, \\ &\text{b)} \quad (\hat{p} + im) C_-(\vec{p}) = 0 \,, \end{aligned} \tag{8.139}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

ce trebuie satisfăcute de vectorii $C_{\pm}(\vec{p})$ din $\mathbf{C}^4$, pentru orice 4-impuls $p = (\vec{p}, E_p)$. Deoarece forma concretă a fiecăreia din ecuaţiile (8.139) este destul de "stufoasă", vom aplica o metodă mai elegantă, anume aceea a *descompunerii matriceale în blocuri* (2×2), care nu numai că oferă, aproape imediat, sistemul fundamental de soluţii ale ecuaţiei Dirac, dar este şi foarte clară intuitiv, cu privire la interpretarea şi semnificaţia rezultatelor.

Fie, pentru început, cazul referenţialului propriu, adică $\vec{p} = 0$, $E_p = m$. Cele două ecuaţii devin

$$\begin{aligned} &\left[\gamma^4(-m) - im\right] C_+(\vec{0}) = 0 \qquad (\beta - 1)\, C_+(\vec{0}) = 0 \\ &\qquad\qquad\qquad\qquad \Leftrightarrow \\ &\left[\gamma^4(-m) + im\right] C_-(\vec{0}) = 0 \qquad (\beta + 1)\, C_-(\vec{0}) = 0\,. \end{aligned} \tag{8.140}$$

Descompunând în blocuri (2×2), cu β dat de (8.12) şi

$$C_{\pm}(\vec{0}) = \begin{pmatrix} \varphi_{\pm}(\vec{0}) \\ \chi_{\pm}(\vec{0}) \end{pmatrix}, \tag{8.141}$$

unde $\varphi_{\pm}(\vec{0})$, $\chi_{\pm}(\vec{0})$ sunt spinori Pauli, obţinem respectiv

$$\begin{aligned} &\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_+(\vec{0}) \\ \chi_+(\vec{0}) \end{pmatrix} = 0 \\ &\begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_-(\vec{0}) \\ \chi_-(\vec{0}) \end{pmatrix} = 0, \end{aligned} \tag{8.142}$$

de unde rezultă imediat $\chi_+(\vec{0}) = 0$ şi $\varphi_-(\vec{0}) = 0$, adică

$$C_+(\vec{0}) = \begin{pmatrix} \varphi_+(\vec{0}) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad C_-(\vec{0}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \chi_-(\vec{0}) \end{pmatrix}. \tag{8.143}$$

Considerând, în general, în spaţiul-spin $\mathcal{S}_2$, introdus în paragraful 3.2.2,

$$\begin{aligned} &\varphi_+(\vec{0}) = a_A\, \xi^A \\ &\chi_-(\vec{0}) = b_A^*\, \xi^A\,, \\ &\sum_{A=1}^{2} |a_A|^2 = \sum_{A=1}^{2} |b_A|^2 = 1\,, \end{aligned} \tag{8.144}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

cu

$$\xi^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \xi^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{8.145}$$

drept bază canonică în $\mathcal{S}_2$, putem spune că $C_+(\vec{0})$ descrie particula, ce are spinul *up*, cu o probabilitate $|a_1|^2$, şi *down*, cu o probabilitate $|a_2|^2$, iar $C_-(\vec{0})$ descrie antiparticula de spin *up*, cu o probabilitate $|b_1|^2$, şi *down*, cu probabilitatea $|b_2|^2$. Prin urmare, ajungem, în mod natural, la setul de soluţii fundamentale ale versiunii simplificate (8.140) (în referenţialul propriu) a ecuaţiilor matriceale (8.139), anume

$$u^A(\vec{0}) = \begin{pmatrix} \xi^A \\ 0 \end{pmatrix}, \; v^A(\vec{0}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \xi^A \end{pmatrix}, \; A = 1,2 \tag{8.146}$$

care, având în vedere (8.145), se observă că formează o bază canonică ortonormală,

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad u^{\dagger A}(\vec{0})\, u^B(\vec{0}) = \delta^{AB} \\ &\text{b)} \quad u^{\dagger A}(\vec{0})\, v^B(\vec{0}) = v^{\dagger B}(\vec{0})\, u^A(\vec{0}) \equiv 0 \\ &\text{c)} \quad v^{\dagger A}(\vec{0})\, v^B(\vec{0}) = \delta^{AB}, \end{aligned} \tag{8.147}$$

a spaţiului liniar ce conţine vectorii "amplitudine"

$$C_+(\vec{0}) = a_A\, u^A(\vec{0}) \; ; \; C_-(\vec{0}) = b_A^*\, v^A(\vec{0}) \, . \tag{8.148}$$

Dat fiind că $\vec{p} = 0$ este singura valoare a impulsului în referenţialul propriu, soluţia generală a ecuaţiei Dirac corespunzătoare este de forma

$$\psi(\tau) = a_A\, u^A(\vec{0}) e^{-im\tau} + b_A^*\, v^A(\vec{0}) e^{im\tau} \, , \tag{8.149}$$

unde τ este timpul propriu, în care am omis factorii de normare $\left[(2\pi)^3\, 2\, m\right]^{-1/2}$, care ar rezulta din (8.148), (8.134) şi (8.132) pentru $\vec{p} = 0$, $p^4 = E_p = m$. Evident, sistemul soluţiilor fundamentale, în raport cu care se exprimă (8.149), este reprezentat de bispinorii

$$\begin{aligned} \psi_+^A(\tau) &= u^A(\vec{0})\, e^{-im\tau} \\ \psi_-^A(\tau) &= v^A(\vec{0})\, e^{im\tau} \end{aligned} \tag{8.150}$$

BCU "ASI" CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

ce corespund particulei $\left(\psi_+^A(\tau)\right)$ şi, respectiv, antiparticulei $\left(\psi_-^A(\tau)\right)$ aflate în stări de spin *up* $(A=1)$ şi, respectiv, *down* $(A=2)$.

Avem acum suficiente elemente pentru rezolvarea ecuaţiilor (8.139), în referenţialul laboratorului, când $p=(\vec{p},\, E_p)$. Generalizând metoda tocmai prezentată, fie

$$C_\pm(\vec{p}) = \begin{pmatrix} \varphi_\pm(\vec{p}) \\ \chi_\pm(\vec{p}) \end{pmatrix} \tag{8.151}$$

şi matricele von Neumann reprezentate prin blocuri matriceale (2×2)

$$\gamma^\mu = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma^\mu \\ i\sigma^\mu & 0 \end{pmatrix}\,,\quad \gamma^4 = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}\,. \tag{8.152}$$

Atunci, ecuaţiile (8.139.a), (8.139.b) devin, respectiv,

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad \left\{\begin{pmatrix} iE_p & -i\vec{p}\cdot\vec{\sigma} \\ i\vec{p}\cdot\vec{\sigma} & -iE_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} -im & 0 \\ 0 & -im \end{pmatrix}\right\}\begin{pmatrix} \varphi_+(\vec{p}) \\ \chi_+(\vec{p}) \end{pmatrix} = 0 \\ &\text{b)}\quad \left\{\begin{pmatrix} iE_p & -i\vec{p}\cdot\vec{\sigma} \\ i\vec{p}\cdot\vec{\sigma} & -iE_p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} im & 0 \\ 0 & im \end{pmatrix}\right\}\begin{pmatrix} \varphi_-(\vec{p}) \\ \chi_-(\vec{p}) \end{pmatrix} = 0\,, \end{aligned} \tag{8.153}$$

şi se pot reprezenta "unificat" sub forma

$$\begin{pmatrix} (E_p \mp m) & -\vec{p}\cdot\vec{\sigma} \\ \vec{p}\cdot\vec{\sigma} & -(E_p \pm m) \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \varphi_\pm(\vec{p}) \\ \chi_\pm(\vec{p}) \end{pmatrix} = 0\,, \tag{8.154}$$

în care pentru sistemul lui $C_+(\vec{p})$ se ia întotdeauna semnul de deasupra, iar pentru sistemul lui $C_-(\vec{p})$, evident, semnul de dedesubt. Rezultă, astfel, sistemul

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad (E_p \mp m)\,\varphi_\pm(\vec{p}) - \vec{p}\cdot\vec{\sigma}\,\chi_\pm(\vec{p}) = 0 \\ &\text{b)}\quad (E_p \pm m)\,\chi_\pm(\vec{p}) - \vec{p}\cdot\vec{\sigma}\,\varphi_\pm(\vec{p}) = 0\,. \end{aligned} \tag{8.155}$$

Cum întotdeauna $E_p + m > 0$, pentru a evita singularităţile induse de o eventuală împărţire prin zero, rezultă că $\chi_+(\vec{p})$ va fi exprimat din (8.155.b), iar $\varphi_-(\vec{p})$ din (8.155.a). Obţinem, deci, spinorii

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad \chi_+(\vec{p}) = \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E_p+m}\,\varphi_+(\vec{p}) \\ &\text{b)}\quad \varphi_-(\vec{p}) = \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E_p+m}\,\chi_-(\vec{p})\,, \end{aligned} \tag{8.156}$$

BCU ŞTIINŢE / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

B.C.U. „M. EMINESCU" IAȘI FIZICĂ

pe care trebuie să-i probăm dacă verifică ecuaţiile complementare, adică (8.155.a) pentru $\chi_+(\vec{p})$ şi (8.155.b) pentru $\varphi_-(\vec{p})$. Într-adevăr, avem

$$\begin{aligned}(E_p - m)\,\varphi_+(\vec{p}) - \vec{p}\cdot\vec{\sigma}\,\chi_+(\vec{p}) &= \left\{E_p - m - \frac{(\vec{p}\cdot\vec{\sigma})^2}{E_p+m}\right\}\varphi_+(\vec{p})\,;\\ (E_p - m)\,\chi_-(\vec{p}) - \vec{p}\cdot\vec{\sigma}\,\varphi_-(\vec{p}) &= \left\{E_p - m - \frac{(\vec{p}\cdot\vec{\sigma})^2}{E_p+m}\right\}\chi_-(\vec{p})\end{aligned} \tag{8.157}$$

şi, cum

$$(\vec{p}\cdot\sigma)^2 = p_\mu\sigma^\mu p_\nu\sigma^\nu = \frac{1}{2}\,\sigma^{(\mu}\sigma^{\nu)}p_\mu p_\nu = \delta^{\mu\nu}p_\mu p_\nu = |\vec{p}|^2\,,$$

adică

$$E_p - m - \frac{(\vec{p}\cdot\vec{\sigma})^2}{E_p+m} = (E_p+m)^{-1}\left[E_p^2 - m^2 - |\vec{p}|^2\right] \equiv 0\,,$$

rezultă imediat

$$\begin{aligned}(E_p - m)\,\varphi_+(\vec{p}) - \vec{p}\cdot\vec{\sigma}\,\chi_+(\vec{p}) &= 0\\ (E_p - m)\,\chi_-(\vec{p}) - \vec{p}\cdot\vec{\sigma}\,\varphi_-(\vec{p}) &= 0\end{aligned} \tag{8.158}$$

oricare ar fi spinorii $\varphi_+(\vec{p})$, $\chi_-(\vec{p})$ în (8.156). Ca şi în metoda referenţialului propriu, pe aceştia îi vom alege coliniari cu vectorii proprii ortonormali ξ^A (daţi de (8.145)) ai operatorului $S_z = (1/2)\,\sigma_z$, adică

$$\varphi_+^A(\vec{p}) = \chi_-^A(\vec{p}) = \mathcal{N}\xi^A\,,\ A = 1,2\,. \tag{8.159}$$

Aici, $\mathcal{N}$ este un factor de normare pe care îl vom stabili puţin mai târziu. Pentru moment, analog construirii sistemului fundamental de bispinori ortonormali (8.146), obţinem din relaţiile (8.159), (8.156) şi (8.151), următorul sistem fundamental de bispinori, ortogonali în cadrul fiecărui subspaţiu $span\{u^A\}_{A=1,2}$, $span\{v^A\}_{A=1,2}$,[2]

$$\begin{aligned}u^A(\vec{p}) &= \mathcal{N}\begin{pmatrix}\xi^A\\ \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E}\xi^A\end{pmatrix}\\ v^A(\vec{p}) &= \mathcal{N}\begin{pmatrix}\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E}\xi^A\\ \xi^A\end{pmatrix},\ \text{cu } A = 1,2\,,\ E = E_p + m\end{aligned} \tag{8.160}$$

[2] adică subîntins de u^A şi, respectiv, v^A.

care formează o bază în spaţiul liniar al vectorilor $C_{\pm}(\vec{p})$, deci

$$\begin{aligned} C_{+}(\vec{p}) &= a_A(\vec{p})\, u^A(\vec{p}) \\ C_{-}(\vec{p}) &= b_A^{\dagger}(\vec{p})\, v^A(\vec{p}) \,. \end{aligned} \tag{8.161}$$

Utilizarea semnului de conjugare hermitică, în locul celui de conjugare complexă folosit, de exemplu, în (8.144), este o chestiune tehnică, de convenabilitate a interpretării fizice a rezultatelor celei de a doua cuantificări, când $a_A(\vec{p})$ vor fi operatori de anihilare a unei particule de impuls $\vec{p}$, iar $b_A^{\dagger}(\vec{p})$, operatori de creare a unei antiparticule (de impuls $\vec{p}$) [13, 37], stările de spin ale acestora fiind precizate de indicele $A \in \{1,2\}$. Atragem încă o dată atenţia că, deşi fiecare pereche $\{u^A\}_{A=1,2}, \{v^A\}_{A=1,2}$ este un sistem bidimensional, de vectori ortogonali, perechile, între ele, nu sunt reciproc ortogonale. Într-adevăr, avem

$$\begin{aligned} u^{\dagger A}(\vec{p}) u^B(\vec{p}) &= |\mathcal{N}|^2 \begin{pmatrix} \xi^{\dagger A} & \xi^{\dagger A} \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi^B \\ \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} \xi^B \end{pmatrix} = \\ &= |\mathcal{N}|^2 \frac{E_p^2 + 2mE_p + m^2 + |\vec{p}|^2}{(E_p+m)^2} \xi^{\dagger A} \xi^B = \\ &= \frac{|\mathcal{N}|^2}{E_p+m} 2E_p \delta^{AB} \\ v^{\dagger A}(\vec{p}) v^B(\vec{p}) &= |\mathcal{N}|^2 \begin{pmatrix} \xi^{\dagger A} \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} & \xi^{\dagger A} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} \xi^B \\ \xi^B \end{pmatrix} = \\ &= |\mathcal{N}|^2 \frac{E_p^2 + 2mE_p + m^2 + |\vec{p}|^2}{(E_p+m)^2} \xi^{\dagger A} \xi^B = \\ &= \frac{|\mathcal{N}|^2}{E_p+m} 2E_p \delta^{AB} \end{aligned} \tag{8.162}$$

dar şi

$$u^{\dagger A}(\vec{p})\, v^B(\vec{p}) = v^{\dagger A}(\vec{p})\, u^B(\vec{p}) = \frac{2|\mathcal{N}|^2}{E_p+m} \xi^{\dagger A} (\vec{p}\cdot\vec{\sigma})\, \xi^B \neq 0 \,, \tag{8.163}$$

în general (pentru $\vec{p}$ oarecare).

În schimb, dacă modificăm semnul impulsului doar în una din perechile $\{u^A(\vec{p})\}_{A=1,2}$ sau $\{v^A(\vec{p})\}_{A=1,2}$, sistemul cuadridimensional astfel obţinut, adică

FCUIASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

$\{u^A(\pm\vec{p}), v^A(\mp\vec{p})\}_{A=1,2}$, este complet ortogonal, în sensul că

$$\begin{aligned}
&\text{a)}\quad u^{\dagger A}(\pm\vec{p})\, u^B(\pm\vec{p}) = \frac{|\mathcal{N}|^2}{E}\, 2E_p\, \delta^{AB} \\
&\text{b)}\quad v^{\dagger A}(\mp\vec{p})\, v^B(\mp\vec{p}) = \frac{|\mathcal{N}|^2}{E}\, 2E_p\, \delta^{AB} \\
&\text{c)}\quad u^{\dagger A}(\pm\vec{p})\, v^B(\mp\vec{p}) = v^{\dagger A}(\mp\vec{p})\, u^B(\pm\vec{p}) = 0\,,
\end{aligned} \tag{8.164}$$

deci perechile $\{u^A(\pm\vec{p})\}_{A=1,2}$ şi $\{v^A(\mp\vec{p})\}_{A=1,2}$ sunt reciproc ortogonale.

Din (8.161) şi (8.132.a) rezultă explicit forma soluţiei generale a ecuaţiei Dirac

$$\psi(x) = \int d^3p \left[a_A(\vec{p})\, u^A(\vec{p})\, f_{\vec{p}}(x) + b^\dagger_A(\vec{p})\, v^A(\vec{p})\, \bar{f}_{\vec{p}}(x)\right] \tag{8.165}$$

în care $\{f_{\vec{p}}(x), \bar{f}_{\vec{p}}(x)\}$ sunt date de relaţia (8.134), iar bispinorii de bază $\{u^A(\vec{p}),\, v^A(\vec{p})\}_{A=1,2}$ au forma (8.160), adică, în mod concret, până la factorul de normare $\mathcal{N}$,

$$\begin{aligned}
u^1(\vec{p}) &= \mathcal{N}\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \frac{p_z}{E} \\ \frac{p_+}{E} \end{pmatrix} \quad ; \quad u^2(\vec{p}) = \mathcal{N}\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ \frac{p_-}{E} \\ -\frac{p_z}{E} \end{pmatrix} \\
v^1(\vec{p}) &= \mathcal{N}\begin{pmatrix} \frac{p_z}{E} \\ \frac{p_+}{E} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad v^2(\vec{p}) = \mathcal{N}\begin{pmatrix} \frac{p_-}{E} \\ -\frac{p_z}{E} \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{8.166}$$

unde $p_\pm = p_x \pm ip_y$. Evident, pentru orice cuadrivector p de forma $(\vec{p}, E_p)$, setul de bispinori

$$\begin{aligned}
\psi^A_{\vec{p}+}(x) &= u^A(\vec{p})\, f_{\vec{p}}(x) \\
\psi^A_{\vec{p}-}(x) &= v^A(\vec{p})\, \bar{f}_{\vec{p}}(x)
\end{aligned} \tag{8.167}$$

reprezintă sistemul fundamental de soluţii ale ecuaţiei Dirac, în raport cu care soluţia generală (8.165) se exprimă simplu, sub forma

$$\begin{aligned}
&\text{a)}\quad \psi(x) = \psi_+(x) + \psi_-(x)\,, \text{ unde avem respectiv} \\
&\text{b)}\quad \psi_+(x) = \int d^3p\, a_A(\vec{p})\, \psi^A_{\vec{p}+}(x) \\
&\text{c)}\quad \psi_-(x) = \int d^3p\, b^\dagger_A(\vec{p})\, \psi^A_{\vec{p}-}(x)\,.
\end{aligned} \tag{8.168}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Aşa cum menţionam şi la început, odată determinaţi $C_{\pm}(\vec{p})$, integrarea adjunctei ecuaţiei Dirac nu mai prezintă nici un fel de dificultate deoarece, în mod automat, $\bar{\psi}(x)$ dat de (8.132.b) cu sistemul de bispinori

$$\bar{C}_{\mp}(\vec{p}) = C^{\dagger}_{\mp}(\vec{p})\beta \tag{8.169}$$

este soluţia generală a acesteia. Fără a mai verifica acest lucru, precizăm doar că setul cuadridimensional de bispinori adjuncţi

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad \bar{u}^A(\vec{p}) = u^{\dagger A}(\vec{p})\beta = \mathcal{N}\begin{pmatrix} \xi^{\dagger A} & -\xi^{\dagger A}\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} \end{pmatrix} \\ &\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad\qquad , A = 1,2 \\ &\text{b)}\quad \bar{v}^A(\vec{p}) = v^{\dagger A}(\vec{p})\beta = \mathcal{N}\begin{pmatrix} \xi^{\dagger A}\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} & -\xi^{\dagger A} \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{8.170}$$

sau, la modul cel mai concret,

$$\begin{aligned} \bar{u}^1(\vec{p}) &= \mathcal{N}\begin{pmatrix} 1 & 0 & -\frac{p_z}{E} & -\frac{p_-}{E} \end{pmatrix} \\ \bar{u}^2(\vec{p}) &= \mathcal{N}\begin{pmatrix} 0 & 1 & -\frac{p_+}{E} & \frac{p_z}{E} \end{pmatrix} \\ \bar{v}^1(\vec{p}) &= \mathcal{N}\begin{pmatrix} \frac{p_z}{E} & \frac{p_-}{E} & 1 & 0 \end{pmatrix} \\ \bar{v}^2(\vec{p}) &= \mathcal{N}\begin{pmatrix} \frac{p_+}{E} & -\frac{p_z}{E} & 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned} \tag{8.171}$$

este un sistem fundamental de soluţii ale ecuaţiilor Dirac adjuncte şi formează o bază în spaţiul liniar dual (în sens Dirac) căruia îi aparţin vectorii $\bar{C}_{\pm}(\vec{p})$ [13]. Din forma soluţiei generale a adjunctei ecuaţiei Dirac

$$\bar{\psi}(x) = \int d^3p \left[b_A(\vec{p})\bar{v}^A(\vec{p}) f_{\vec{p}}(x) + a^{\dagger}_A(\vec{p})\bar{u}^A(\vec{p})\bar{f}_{\vec{p}}(x) \right], \tag{8.172}$$

cu $\left\{ \bar{v}^A(\vec{p}),\, \bar{u}^A(\vec{p}) \right\}_{A=1,2}$ daţi de (8.170) sau (8.171), observăm că setul de bispinori adjuncţi, $\bar{\psi} : \mathbf{R}^4 \to \mathbf{C}^4$, pentru $p = (\vec{p}, E_p)$, adică

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad \bar{\psi}^A_{\vec{p}-}(x) = \overline{\left(\psi^A_{\vec{p}+}(x)\right)} = \bar{u}^A(\vec{p})\bar{f}_{\vec{p}}(x) \\ &\text{b)}\quad \bar{\psi}^A_{\vec{p}+}(x) = \overline{\left(\psi^A_{\vec{p}-}(x)\right)} = \bar{v}^A(\vec{p}) f_{\vec{p}}(x) \end{aligned} \tag{8.173}$$

reprezintă sistemul fundamental de soluţii ale ecuaţiei adjuncte (8.104) astfel încât $\bar{\psi}(x)$ se poate exprima sub forma $\bar{\psi}(x) = \bar{\psi}_+(x) + \bar{\psi}_-(x)$, cu

$$\bar{\psi}_+(x) = \overline{\psi_-(x)} \;\; ; \;\; \bar{\psi}_-(x) = \overline{\psi_+(x)},$$

BUJIAS CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

unde

$$\bar{\psi}_+(x) = \int d^3p\, b_A(\vec{p})\bar{\psi}^A_{\vec{p}+}(x) \;;\; \bar{\psi}_-(x) = \int d^3p\, a^\dagger_A(\vec{p})\bar{\psi}^A_{\vec{p}-}(x)\,. \qquad (8.174)$$

Profitând de expresiile (8.170) şi (8.160) ale celor două sisteme fundamentale, intuitiv reciproc duale, în sens Dirac, să urmărim mai în detaliu proprietăţile algebrice esenţiale ale acestora. În primul rând, referitor la legătura ce există între conjugarea Dirac, conjugarea Hermite şi reflexia spaţială a impulsului $\vec{p}$, observăm că (fără a mai menţiona factorul $\mathcal{N}$)

$$u^{\dagger A}(\vec{p}) = \begin{pmatrix} \xi^{\dagger A} & \xi^{\dagger A}\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \xi^{\dagger A} & -\xi^{\dagger A}\frac{-\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} \end{pmatrix} = \bar{u}^A(-\vec{p})$$

$$v^{\dagger A}(\vec{p}) = \begin{pmatrix} \xi^{\dagger A}\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} & \xi^{\dagger A} \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} \xi^{\dagger A}\frac{-\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} & -\xi^{\dagger A} \end{pmatrix} = -\bar{v}^A(-\vec{p}), \qquad (8.175)$$

adică bispinorii adjuncţi $\left\{\bar{u}^A(\vec{p})\,,\,\bar{v}^A(\vec{p})\right\}_{A=1,2}$ au proprietatea algebrică "internă"

$$\begin{aligned} \bar{u}^A(\vec{p}) &= u^{\dagger A}(-\vec{p}) \\ \bar{v}^A(\vec{p}) &= -v^{\dagger A}(-\vec{p})\,. \end{aligned} \qquad (8.176)$$

În al doilea rând, inspiraţi de relaţiile (8.164) şi de proprietatea algebrică tocmai demonstrată, putem verifica efectiv dualitatea Dirac a celor două baze $\left\{u^A(\vec{p})\,,\,v^A(\vec{p})\right\}_{A=1,2}$, $\left\{\bar{u}^A(\vec{p})\,,\,\bar{v}^A(\vec{p})\right\}_{A=1,2}$, deoarece

$$\begin{aligned} \bar{u}^A(\vec{p})\,u^B(\vec{p}) &= \begin{pmatrix} \xi^{\dagger A} & -\xi^{\dagger A}\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \xi^B \\ \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E}\xi^B \end{pmatrix}|\mathcal{N}|^2 = \\ &= \delta^{AB}\left[1 - \frac{|\vec{p}|^2}{E^2}\right]|\mathcal{N}|^2 \\ \bar{v}^A(\vec{p})\,v^B(\vec{p}) &= \begin{pmatrix} \xi^{\dagger A}\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} & -\xi^{\dagger A} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E}\xi^B \\ \xi^B \end{pmatrix}|\mathcal{N}|^2 = \\ &= -\delta^{AB}\left[1 - \frac{|\vec{p}|^2}{E^2}\right]|\mathcal{N}|^2 \\ \bar{u}^A(\vec{p})\,v^B(\vec{p}) &= u^{\dagger A}(-\vec{p})\,v^B(\vec{p}) \equiv 0 \quad (\text{din (8.164.c)} \\ \bar{v}^A(\vec{p})\,u^B(\vec{p}) &= -v^{\dagger A}(-\vec{p})\,u^B(\vec{p}) \equiv 0 \quad (\text{din (8.164.c)}\,. \end{aligned} \qquad (8.177)$$

BCU IAŞI / CENTRALA UNIVERSITARĂ LIBRARY

Cum

$$1 - \frac{|\vec{p}|^2}{E^2} = \frac{E_p^2 + 2mE_p + m^2 - \left(E_p^2 - m^2\right)}{(E_p + m)^2} = \frac{2m}{E_p + m},$$

obţinem concret relaţiile de dualitate (în sens Dirac)

$$\text{a)} \quad \bar{u}^A(\vec{p})\, u^B(\vec{p}) = -\bar{v}^A(\vec{p})\, v^B(\vec{p}) = \frac{|\mathcal{N}|^2}{E_p + m} 2m\, \delta^{AB}, \quad (\forall)\, A, B \in \{1, 2\}$$

$$\text{b)} \quad \bar{u}^A(\vec{p})\, v^B(\vec{p}) = \bar{v}^A(\vec{p})\, u^B(\vec{p}) = 0\,. \tag{8.178}$$

În ceea ce priveşte termenii ştiinţifici, dorim să precizăm, pentru a evita confuziile sau neînţelegerile ce ar putea rezulta din "alinierea" la nomenclatura întrebuinţată în alte lucrări de specialitate, că preferăm pentru proprietăţile (8.178) denumirea de *relaţii de dualitate*, deoarece, în general, duala $\mathcal{B}^* = \{\omega^a\}_{a=\overline{1,n}} \in V_n^*$ a unei baze $\mathcal{B} = \{e_a\}_{a=\overline{1,n}} \in V_n$ se defineşte prin

$$\langle \omega^a\,,\, e_b \rangle = \delta_b^a\,,\ (\forall)\, a, b \in \{1, 2, \ldots, n\}\,. \tag{8.179}$$

Croşetul $\langle , \rangle : V_n^* \times V_n \to \mathbf{R}$ este operaţia biliniară de contracţie a oricărui element din spaţiu dual V_n^*, să spunem $\sigma = \sigma_a \omega^a$, cu oricare alt element din V_n, să zicem $q = q^b\, e_b$, şi anume,

$$\langle \sigma\,,\, q \rangle = \sigma_c\, q^c$$

(cu sumare după c, de la 1 la n). Or, în mod evident, sistemele $\{\bar{u},\, \bar{v}\}$ şi $\{u,\, v\}$ nu aparţin aceluiaşi spaţiu liniar şi satisfac o relaţie de tip (8.179). Semnul "negativ" prezent în contracţiile $\bar{v}v$ provine de la matricea β, utilizată în definirea conjugării Dirac, şi este legat, sub aspect fizic, de existenţa stărilor de energie (frecvenţă) negativă, care sunt, de fapt, o tară a tuturor teoriilor cuantice relativiste. Alţi autori preferă, pentru relaţiile (8.178), denumirea de "proprietate de pseudoortonormalitate" a vectorilor bazei

$$\mathcal{W} = \left\{ w^a(\vec{p}) | w^A(\vec{p}) = u^A(\vec{p}),\, w^{A+2}(\vec{p}) = v^A(\vec{p}) \right\}_{a=\overline{1,4}},$$

dat fiind că, luând

$$\mathcal{N} = \left[\frac{E_p + m}{2m}\right]^{1/2},$$

BCU IAŞI CENTRUL UNIVERSITAR LIBRARY

pot introduce produsul scalar ca aplicaţia biliniară

$$g : span\{\mathcal{W}\} \times span\{\mathcal{W}\} \to \mathbf{R},$$

definită prin

$$g\left(w^a(\vec{p}), w^b(\vec{p})\right) = \bar{w}^a(\vec{p})\, w^b(\vec{p}) = g^{ab}. \tag{8.180}$$

Evident, din

$$w^A(\vec{p}) = u^A(\vec{p}), \quad w^{A+2}(\vec{p}) = v^A(\vec{p})$$

şi (8.178), rezultă metrica indefinită, de signatură zero,

$$\left(g^{ab}\right) = \mathrm{diag}\,[1, 1, -1, -1]. \tag{8.181}$$

Revenind la subiect, dar având în minte posibilităţile de utilizare a inversei

$$(g_{ab}) = \mathrm{diag}\,[1, 1, -1, -1]$$

a matricei (8.181), să demonstrăm şi a treia proprietate esenţială a sistemelor fundamentale, reciproc duale, de bispinori

$$\left\{\bar{u}^A(\vec{p}), \bar{v}^A(\vec{p})\right\}_{A=1,2}, \quad \left\{u^A(\vec{p}), v^A(\vec{p})\right\}_{A=1,2}$$

şi anume, proprietatea de completitudine

$$g_{ab} w^a(\vec{p}) \bar{w}^b(\vec{p}) = 1 \Leftrightarrow \delta_{AB}\left[u^A(\vec{p})\bar{u}^B(\vec{p}) - v^A(\vec{p})\bar{v}^B(\vec{p})\right] = 1, \tag{8.182}$$

unde 1 este matricea unitate (4×4).

Într-adevăr, din (8.170) şi (8.160) avem

$$\begin{aligned}
\delta_{AB}\, u^A(\vec{p})\bar{u}^B(\vec{p}) &= \delta_{AB} \begin{pmatrix} \xi^A \\ \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E}\xi^A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi^{\dagger B} & -\xi^{\dagger B}\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} \end{pmatrix} |\mathcal{N}|^2 = \\
&= |\mathcal{N}|^2 \begin{pmatrix} \delta_{AB}\xi^A\xi^{\dagger B} & -\delta_{AB}\xi^A\xi^{\dagger B}\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} \\ \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E}\xi^A\xi^{\dagger B}\delta_{AB} & -\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E}\delta_{AB}\xi^A\xi^{\dagger B}\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} \end{pmatrix} \\
\delta_{AB}\, v^A(\vec{p})\bar{v}^B(\vec{p}) &= \delta_{AB} \begin{pmatrix} \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E}\xi^A \\ \xi^A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi^{\dagger B}\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} & -\xi^{\dagger B} \end{pmatrix} |\mathcal{N}|^2 = \\
&= |\mathcal{N}|^2 \begin{pmatrix} \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E}\delta_{AB}\xi^A\xi^{\dagger B}\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} & -\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E}\xi^A\xi^{\dagger B}\delta_{AB} \\ \delta_{AB}\xi^A\xi^{\dagger B}\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} & -\delta_{AB}\xi^A\xi^{\dagger B} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{8.183}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi cum

$$\delta_{AB}\,\xi^A\xi^{\dagger B} = 1\,,\ \text{cu}\ 1 = \text{diag}\,(1,\,1)\,, \tag{8.184}$$

rezultă

$$\begin{aligned}
&\text{a)}\quad \delta_{AB}\,u^A(\vec{p})\bar{u}^B(\vec{p}) = |\mathcal{N}|^2 \begin{pmatrix} 1 & -\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} \\ \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} & -\frac{|\vec{p}|^2}{E^2} \end{pmatrix} \\
&\text{b)}\quad \delta_{AB}\,v^A(\vec{p})\bar{v}^B(\vec{p}) = |\mathcal{N}|^2 \begin{pmatrix} \frac{|\vec{p}|^2}{E^2} & -\frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} \\ \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E} & -1 \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{8.185}$$

deci, luând diferenţa dintre relaţiile (8.185.a) şi (8.185.b), obţinem

$$\delta_{AB}\left[u^A(\vec{p})\bar{u}^B(\vec{p}) - v^A(\vec{p})\bar{v}^B(\vec{p})\right] = |\mathcal{N}|^2\,\frac{2m}{E_p+m}\,1\,, \tag{8.186}$$

adică tocmai (8.182), pentru $\mathcal{N} = \left(\frac{E_p+m}{2m}\right)^{1/2}$. Bineînţeles, pentru un factor de normare deocamdată nespecificat, relaţia de completitudine (8.182) se va scrie, de fapt, sub forma (8.186).

În fine, existenţa unor relaţii de completitudine, în general, este deosebit de utilă în studiul unor operatori liniari de interes tehnic special, şi anume, *proiectorii*. De aceea, ne vom ocupa în încheierea acestui paragraf de aşa-numiţii *proiectori Dirac de energie*. Atributul *de energie*, este necesar pentru a-i deosebi de ceilalţi proiectori foarte importanţi, mai ales în teoria câmpului spinorial nemasiv (cum este cel neutrinic), şi anume *proiectorul de spin* şi *proiectorii de chiralitate*. Să pornim de la proprietatea seturilor bidimensionale de bispinori $\left\{u^A(\vec{p})\right\}_{A=1,2}$, $\left\{v^A(\vec{p})\right\}_{A=1,2}$ de a fi soluţii fundamentale ale ecuaţiilor matriceale (8.139.a), respectiv (8.139.b), adică

$$\begin{aligned}
&\text{a)}\quad (\hat{p} - im)\,u^A(\vec{p}) = 0 \\
&\text{b)}\quad (\hat{p} + im)\,v^A(\vec{p}) = 0\,.
\end{aligned} \tag{8.187}$$

Cineva şi-ar putea pune acum întrebarea ce se întâmplă dacă, în (8.187), schimbăm între ei bispinorii u, v, adică "dacă uităm cine asupra cui acţionează". Atunci,

BCU IAŞI - CENTRUL UNIVERSITAR - LIBRARY

avem

$$\begin{aligned}
\text{a)}\quad & (\hat{p} + im)\, u^A(\vec{p}) = \\
& = i \begin{pmatrix} E_p + m & -\vec{p}\cdot\vec{\sigma} \\ \vec{p}\cdot\vec{\sigma} & -(E_p - m) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi^A \\ \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E_p+m}\,\xi^A \end{pmatrix} \mathcal{N} = \\
& = 2im \begin{pmatrix} \xi^A \\ \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E}\,\xi^A \end{pmatrix} \mathcal{N} \\
\text{b)}\quad & (\hat{p} - im)\, v^A(\vec{p}) = \\
& = i \begin{pmatrix} E_p - m & -\vec{p}\cdot\vec{\sigma} \\ \vec{p}\cdot\vec{\sigma} & -(E_p + m) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E_p+m}\,\xi^A \\ \xi^A \end{pmatrix} \mathcal{N} = \\
& = -2im \begin{pmatrix} \frac{\vec{p}\cdot\vec{\sigma}}{E}\,\xi^A \\ \xi^A \end{pmatrix} \mathcal{N}\,,
\end{aligned} \tag{8.188}$$

adică

$$\begin{aligned}
&\text{a)}\quad (\hat{p} + im)\, u^A(\vec{p}) = 2im\, u^A(\vec{p}) \\
&\text{b)}\quad (\hat{p} - im)\, v^A(\vec{p}) = -2im\, v^A(\vec{p})\,,
\end{aligned} \tag{8.189}$$

de unde tragem concluzia că operatorul

$$\Lambda_+ = \frac{\hat{p} + im}{2im} \tag{8.190}$$

are bispinorii $u^A(\vec{p})$, ai bazei în subspaţiul frecvenţelor pozitive, drept vectori proprii de valoare principală $\lambda_+^{(1)} = 1$ şi "distruge", pe baza ecuaţiei (8.187.b), vectorii $v^A(\vec{p})$ ai bazei din subspaţiul frecvenţelor negative. Altfel spus, aceştia îi sunt vectori proprii corespunzători valorii principale $\lambda_+^{(2)} = 0$. Similar, din (8.189.b), rezultă că operatorul

$$\Lambda_- = -\frac{\hat{p} - im}{2im} \tag{8.191}$$

are vectorii proprii $v^A(\vec{p})$, ai bazei de frecvenţe negative, corespunzători valorii proprii $\lambda_-^{(1)} = 1$, şi-i "distruge" pe cei ai bazei de frecvenţe pozitive, $\{u^A(\vec{p})\}_{A=1,2}$, care-i sunt vectori proprii de valoare principală $\lambda_-^{(2)} = 0$. Pe

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

scurt,

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad \Lambda_+ u^A(\vec{p}) = \lambda_+^{(1)} u^A(\vec{p}) = u^A(\vec{p}) \\ &\text{b)}\quad \Lambda_+ v^A(\vec{p}) = \lambda_+^{(2)} v^A(\vec{p}) = 0 \\ &\text{c)}\quad \Lambda_- v^A(\vec{p}) = \lambda_-^{(1)} v^A(\vec{p}) = v^A(\vec{p}) \\ &\text{d)}\quad \Lambda_- u^A(\vec{p}) = \lambda_-^{(2)} u^A(\vec{p}) = 0\,. \end{aligned} \tag{8.192}$$

Prezenţa unor proprietăţi, ca existenţa valorilor proprii 0, 1 şi invarianţa unui subspaţiu, acompaniată de eliminarea altuia, sugerează deja că operatorii Λ_+ şi Λ_- sunt proiectorii pe care îi căutăm. Prin acţiunea lor, ei proiectează spaţiul liniar complex al soluţiilor ecuaţiei Dirac pe subspaţiul soluţiilor de energie pozitivă şi, respectiv, negativă; de aici şi denumirea de proiectori Dirac de energie. Oricum, trebuie să demonstrăm că operatorii $\Lambda_\pm$ satisfac următoarele proprietăţi (cărora li se mai spune *globale*, din cauza independenţei exprimării lor de natura şi forma elementelor spaţiilor liniare pe care sunt formulate) specifice proiectorilor, şi anume

(i) *Idempotenţa* : $\Lambda_+^2 = \Lambda_+$; $\Lambda_-^2 = \Lambda_-$;

(ii) *Ortogonalitatea* : $\Lambda_+ \Lambda_- = \Lambda_- \Lambda_+ = 0$;

(iii) *Completitudinea* : $\Lambda_+ + \Lambda_- = 1$. (8.193)

Într-adevăr, putem arăta imediat că

$$\Lambda_+ + \Lambda_- = \frac{\hat{p} + im}{2im} - \frac{\hat{p} - im}{2im} = 1$$

şi, de asemenea,

$$\Lambda_+ \Lambda_- = \frac{1}{4m^2}\left(p^2 + m^2\right) = \Lambda_- \Lambda_+ \equiv 0\,,$$

care rezultă din proprietatea

$$\hat{p}\hat{p} = \gamma^i \gamma^k p_i p_k = \eta^{ik} p_i p_k = p^2$$

şi condiţia *on-shell* $p^2 + m^2 = 0$. Astfel, relaţiile (8.193.iii, ii) fiind practic demonstrate, mai avem de arătat (8.193.i). Fie, deci, Λ_+ dat de (8.190) şi, calculând Λ_+^2, avem imediat

$$\Lambda_+^2 = -\frac{1}{4m^2}\left(2im\,\hat{p} - m^2 + p^2\right) = -\frac{2im}{4m^2}\left(\hat{p} + im\right) \equiv \Lambda_+\,.$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Analog, pentru Λ_- dat de (8.191), avem

$$\Lambda_-^2 = \frac{1}{4m^2}\left(2im\hat{p} + m^2 - p^2\right) = \frac{2im}{4m^2}\left(\hat{p} - im\right) \equiv \Lambda_- .$$

Ce se poate spune despre hermiticitatea operatorilor $\Lambda_\pm$? În acest sens, observăm că au loc relaţiile

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad \Lambda_+^\dagger = \left(\frac{\hat{p}+im}{2im}\right)^\dagger = -\frac{\hat{p}^\dagger - im}{2im} = \frac{-\hat{p}^\dagger + im}{2im}, \\ &\text{b)}\quad \Lambda_-^\dagger = -\left(\frac{\hat{p}-im}{2im}\right)^\dagger = \frac{\hat{p}^\dagger + im}{2im} = -\frac{-\hat{p}^\dagger - im}{2im}, \end{aligned} \tag{8.194}$$

deci, dacă ar fi îndeplinită antihermiticitatea $\hat{p}^\dagger = -\hat{p}$, atunci cei doi proiectori ar fi hermitici. Dar, din proprietăţile (8.98) ale matricelor von Neumann, rezultă

$$\hat{p}^\dagger + \hat{p} = \gamma^\mu p_\mu - \gamma^4 p_4 + \gamma^\mu p_\mu + \gamma^4 p_4 = 2\gamma^\mu p_\mu$$

şi, astfel, deducem că operatorii $\Lambda_\pm$ sunt hermitici numai în referenţialul propriu, în care $\vec{p} = 0$. Fizic vorbind, dat fiind că pentru bispinori conjugarea Dirac are un sens mai profund decât cel al conjugării hermitice (de exemplu, $\bar{\psi}\psi$ este un invariant relativist, în timp ce $\psi^\dagger\psi$ este "doar" componenta temporală a cuadricurentului), ne aşteptam oarecum la acest rezultat. Lăsându-ne în continuare purtaţi de această intuiţie, a "dominanţei" conjugării Dirac faţă de cea hermitică, putem bănui că proiectorii de energie vor fi, probabil, Dirac-autoadjuncţi, adică

$$\beta\Lambda_\pm^\dagger\beta \equiv \bar{\Lambda}_\pm = \Lambda_\pm . \tag{8.195}$$

Într-adevăr, apelând la relaţiile (8.194), avem

$$\begin{aligned} \bar{\Lambda}_+ &= \beta\Lambda_+^\dagger\beta = \frac{1}{2im}\left[-\beta\hat{p}^\dagger\beta + im\right] \\ \bar{\Lambda}_- &= \beta\Lambda_-^\dagger\beta = -\frac{1}{2im}\left[-\beta\hat{p}^\dagger\beta - im\right] \end{aligned}$$

şi, cum

$$-\beta\hat{p}^\dagger\beta = -\beta\gamma^\mu\beta p_\mu + \gamma^4 p_4 = \gamma^\mu p_\mu + \gamma^4 p_4 \equiv \hat{p},$$

obţinem imediat proprietatea (8.195), de Dirac-autoadjunctivitate a proiectorilor de energie; de aici şi denumirea de proiectori Dirac.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

În fine, mai avem de tratat o singură chestiune importantă, şi anume reprezentarea proiectorilor de energie pe produsul tensorial al spaţiilor liniare reciproc Dirac-duale $span\,\mathcal{W} \otimes span\,\bar{\mathcal{W}}$. Formal, soluţia acestei probleme nu este dificilă, dat fiind că, în baza proprietăţilor de proiecţie (8.192) şi a ortogonalităţii-Dirac (8.178.b), operatorii Λ_+, Λ_- vor avea componente doar în subspaţiile tensoriale $span\{u^A(\vec{p})\}_{A=1,2} \otimes span\{\bar{u}^B(\vec{p})\}_{B=1,2}$, pentru Λ_+ şi, respectiv, $span\{v^A(\vec{p})\}_{A=1,2} \otimes span\{\bar{v}^B(\vec{p})\}_{B=1,2}$, pentru Λ_-. Totuşi, trebuie avut în vedere că, pentru un factor $\mathcal{N}$ oarecare (constrâns cel mult de a fi în $\mathbf{R}_+$) metricile g_+^{AB}, g_-^{AB} definite în sensul relaţiei (8.180) pe subspaţiile $span\{u^A(\vec{p})\}$, $span\{v^A(\vec{p})\}$ nu sunt normate la unitate, ci avem, în baza relaţiilor de dualitate (8.178.a),

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad g_+^{AB} = \mathrm{g}\left(u^A(\vec{p})\,,\, u^B(\vec{p})\right) = \bar{u}^A(\vec{p})u^B(\vec{p}) = \frac{|\mathcal{N}|^2}{E}\,2m\,\delta^{AB} \\ &\text{b)}\quad g_-^{AB} = \mathrm{g}\left(v^A(\vec{p})\,,\, v^B(\vec{p})\right) = \bar{v}^A(\vec{p})v^B(\vec{p}) = -\frac{|\mathcal{N}|^2}{E}\,2m\,\delta^{AB}\,. \end{aligned} \tag{8.196}$$

În mod corespunzător, inversele acestor metrici vor avea elementele

$$\begin{aligned} g^{(+)}_{AB} &= \frac{E}{|\mathcal{N}|^2}\,\frac{1}{2m}\,\delta_{AB}\,; \\ g^{(-)}_{AB} &= -\frac{E}{|\mathcal{N}|^2}\,\frac{1}{2m}\,\delta_{AB}\,. \end{aligned} \tag{8.197}$$

Atunci, reprezentând proiectorii Dirac de energie sub forma

$$\begin{aligned} \Lambda_+ &= (\Lambda_+)_{AB}\; u^A(\vec{p})\bar{u}^B(\vec{p})\,; \\ \Lambda_- &= (\Lambda_-)_{AB}\; v^A(\vec{p})\bar{v}^B(\vec{p}) \end{aligned} \tag{8.198}$$

vom avea că

$$\begin{aligned} \bar{u}^C(\vec{p})\Lambda_+ u^D(\vec{p}) &= \bar{u}^C(\vec{p})u^D(\vec{p}) = g_+^{CD} = (\Lambda_+)^{CD} = \\ &= (\Lambda_+)_{AB}\, g_+^{CA} g_+^{BD} = g_+^{CA} g_+^{BD} (\Lambda_+)_{AB} \\ \bar{v}^C(\vec{p})\Lambda_- v^D(\vec{p}) &= \bar{v}^C(\vec{p})v^D(\vec{p}) = g_-^{CD} = (\Lambda_-)^{CD} = \\ &= (\Lambda_-)_{AB}\, g_-^{CA} g_-^{BD} = g_-^{CA} g_-^{BD} (\Lambda_-)_{AB}\,, \end{aligned}$$

adică

$$\begin{aligned} g_+^{CA} g_+^{BD}\,(\Lambda_+)_{AB} = g_+^{CD} \;&\Rightarrow\; (\Lambda_+)_{AB} = g^{(+)}_{AB} \\ g_-^{CA} g_-^{BD}\,(\Lambda_-)_{AB} = g_-^{CD} \;&\Rightarrow\; (\Lambda_-)_{AB} = g^{(-)}_{AB}\,, \end{aligned} \tag{8.199}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

astfel încât rezultă simplu, din (8.197), că

$$(\Lambda_+)_{AB} = \frac{E_p + m}{|\mathcal{N}|^2} \frac{1}{2m} \delta_{AB} ;$$
$$(\Lambda_-)_{AB} = -\frac{E_p + m}{|\mathcal{N}|^2} \frac{1}{2m} \delta_{AB} , \qquad (8.200)$$

deci reprezentările căutate, (8.198), sunt date explicit de relaţiile

$$\Lambda_+ = \frac{E_p + m}{|\mathcal{N}|^2} \frac{1}{2m} \delta_{AB} u^A(\vec{p}) \bar{u}^B(\vec{p})$$
$$\Lambda_- = -\frac{E_p + m}{|\mathcal{N}|^2} \frac{1}{2m} \delta_{AB} v^A(\vec{p}) \bar{v}^B(\vec{p}) , \qquad (8.201)$$

valabile oricare ar fi factorul de normare $\mathcal{N}$. Proprietăţile (8.193) sunt mai mult decât evidente, iar forma "bloc-matriceală (2×2)", de reprezentare a proiectorilor Dirac de energie (8.201), se poate da pe loc, dacă utilizăm rezultatul obţinut deja, anume (8.185).

8.7 Spre a doua cuantificare

Puţine domenii din Fizică au cunoscut în dezvoltarea lor o perioadă atât de explozivă cum a fost cea de la sfârşitul anilor '20 pentru Mecanica Cuantică. În 1923–1924, ipotezele de Broglie, conceptul de undă asociată şi, în general, "dualismul undă–corpuscul", devin patrimoniu ştiinţific internaţional. În 1925, Heisenberg fundamentează mecanica matriceală şi prezintă ca primă, dar deosebit de importantă, aplicaţie cuantificarea oscilatorului liniar armonic. În 1926, cum spunea Dirac, totul a explodat. Schrödinger, descoperind ecuaţia care îi poartă numele, conferă funcţiei de undă o substanţialitate matematică deosebită, dezvoltă mecanica ondulatorie şi demonstrează efectiv echivalenţa formulării liniar-autoadjunct-operatoriale pe spaţii Hilbert a acesteia, cu formularea matriceală introdusă de Heisenberg, punând bazele Mecanicii Cuantice. În această fundaţie, exact în acelaşi an, Gordon ancorează armătura primului element structural relativist, şi anume ecuaţia Poincaré invariantă a funcţiei de undă a particulei scalare, iar după numai un an, Klein "cuplează" la aceasta câmpul electromagnetic. Interesantă coincidenţă, tot în 1927, acest câmp "se lasă" cuantificat de către Dirac, stabilindu-se astfel primul reper pe calea celei de

BCU CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

a doua cuantificări. În 1928, are loc o nouă explozie de idei şi rezultate, cu mult mai puternică decât cea din 1926. Dacă de Broglie şi Gordon ridicaseră, fiecare, câte un colţ al perdelei ce acoperea fizica proceselor din microcosmos, Dirac, Jordan, Pauli, Wigner, Bohr şi Heisenberg o dau aproape complet la o parte. Prin descoperirea ecuaţiei care îi poartă numele, Dirac finisează practic edificiul Mecanicii Cuantice Relativiste, justificând spinul 1/2 al electronului, explicând aşa-numita "anomalie de spin" şi prevăzând existenţa antiparticulelor. Tot el îmbracă Mecanica Cuantică cu o nouă haină, aceea a formalismului *bra-ket*, care devine modalitatea standard de simbolistică şi exprimare în acest domeniu. Cu intuiţia-i caracteristică, Bohr sesizează, încă din 1925, că relaţiile de comutare impuls–coordonată, postulate de Heisenberg, au un caracter cu mult mai profund, fiind general valabile pentru variabilele canonice conjugate ale oricărui sistem fizic (de spin întreg) şi după o perioadă de cercetări intense, în care, după cum spunea Gamow, *uitase complet de propria-i persoană*, el obţine ceea ce astăzi numim *relaţiile de comutare Bohr–Heisenberg* pentru câmpurile bozonice. Acestea se încadrau perfect în metoda generală de cuantificare a sistemelor fizice, dezvoltată, tot în 1928, de către Jordan, Pauli şi Wigner, atât pentru valorile întregi ale spinului, cât şi pentru cele semi-întregi. În esenţă era vorba de superioritatea imaginii Heisenberg (faţă de imaginea Schrödinger, devenită "tradiţională" în Mecanica Cuantică ortodoxă). Aceasta permitea, prin integrarea ecuaţiilor canonice Hamilton–Heisenberg, obţinerea observabilelor fundamentale ale sistemului în termenii unor *operatori de ridicare şi coborâre*, în raport cu care se defineau stările (cuantice ale) sistemului, ca elemente ale unui spaţiu Hilbert abstract, numit *spaţiu Fock*. Se pun astfel bazele Teoriei Cuantice a Câmpurilor, Heisenberg şi Pauli sintetizând, în 1929, tot acest sistem de axiome şi principii în ceea ce, de la ei încoace, poartă numele de *metoda canonică de cuantificare*. Funcţionalitatea acesteia este demonstrată concret în 1934 de către Pauli şi Weisskopf, prin cuantificarea câmpului scalar, iar aserţiunea conform căreia câmpurile bozonice se cuantifică prin relaţii de comutare, iar cele fermionice prin relaţii de anticomutare, este lămurită complet de către Pauli, în perioada 1936–1940, prin lucrările sale asupra *legăturii spin–statistică*.

Oscilatorul liniar armonic în imagine Heisenberg

Acesta este cel mai simplu exemplu netrivial de aplicare a metodei Jordan–Pauli–Heisenberg de cuantificare. Fie o microparticulă scalară nerelativistă, de

masă m, "obligată" să evolueze într-un câmp conservativ, de tip elastic, care îi conferă energia potenţială

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 .$$

Din lagrangeianul

$$L = \frac{1}{2} m \dot{x}^2 - V(x)$$

rezultă forma bine cunoscută a hamiltonianului

$$H = \frac{1}{2m} p^2 + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 , \text{ cu } p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m \dot{x} \Leftrightarrow \dot{x} = m^{-1} p ,$$

cu ajutorul căreia ecuaţiile canonice ale lui Hamilton

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \frac{\partial H}{\partial p} \\ \dot{p} &= -\frac{\partial H}{\partial x} \end{aligned}$$

iau forma concretă

$$\begin{aligned} \dot{x} &= m^{-1} p \\ \dot{p} &= -m \omega_0^2 x . \end{aligned}$$

Cuantificarea se realizează prin impunerea relaţiei de comutare Heisenberg

$$[p, x] = -i , \quad \hbar = 1$$

celor două soluţii (canonic conjugate) p şi x, interpretate ca operatori (liniari) autoadjuncţi în imagine Heisenberg (deci cu dependenţă temporală explicită, stările asupra cărora acţionează fiind, însă, "fixe"). Derivând în raport cu t prima ecuaţie canonică şi înlocuind $\dot{p}$ din a doua, rezultă ecuaţia cu "alură clasică"

$$\ddot{x} + \omega_0^2 x = 0 ,$$

având ca soluţie operatorul coordonată

$$x(t) = a e^{-i\omega_0 t} + a^\dagger e^{i\omega_0 t} ,$$

BCU Cluj / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

în care operatorul liniar a intervine împreună cu conjugatul său hermitic $a^\dagger$, deoarece $x(t)$ trebuie să fie un operator autoadjunct. Pentru operatorul impuls obţinem, atunci,

$$p(t) = -im\omega_0 \left[a\, e^{-i\omega_0 t} - a^\dagger\, e^{i\omega_0 t}\right] ,$$

astfel încât relaţia Heisenberg devine

$$\left[a\,,\, a^\dagger\right] = (2m\omega_0)^{-1} .$$

Prin "normarea"

$$c = \sqrt{2m\omega_0}\, a \;\;,\;\; c^\dagger = \sqrt{2m\omega_0}\, a^\dagger ,$$

se stabileşte algebra

$$\left[c\,,\, c^\dagger\right] = 1$$

a celor doi "operatori de mişcare", cum îi numeşte Dirac, c şi $c^\dagger$. Observabilele coordonată şi impuls se scriu, respectiv,

$$x(t) = \frac{1}{\sqrt{2m\omega_0}} \left(c\, e^{-i\omega_0 t} + c^\dagger\, e^{i\omega_0 t}\right) ,$$

$$p(t) = -i\sqrt{\frac{m\omega_0}{2}} \left(c\, e^{-i\omega_0 t} - c^\dagger\, e^{i\omega_0 t}\right) ,$$

iar operatorul hamiltonian devine

$$H = \omega_0 \left[c^\dagger c + \frac{1}{2}\right] ,$$

fiind, în mod evident, o *constantă a mişcării.* După cum se poate observa, energia de zero, $\frac{\omega_0}{2}$, a apărut deja, iar în ceea ce priveşte restul cuantificării, rolul dominant revine operatorului

$$N = c^\dagger c ,$$

numit simplu *number operator* sau, mai pe larg, *operator număr de excitare.* Setul complet ortonormal de vectori proprii ai acestuia va forma baza spaţiului

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Hilbert al tuturor stărilor cuantice ale sistemului, iar valorile proprii corespunzătoare vor cuantifica energia. Pentru identificarea acestor elemente, să presupunem că există o stare $|0\rangle$, de normă unitate

$$\langle 0|0\rangle = 1 ,$$

numită *stare fundamentală* (sau *ground state*) care, prin definiţie, este anihilată de operatorul c, adică

$$c|0\rangle = 0 \;\Leftrightarrow\; \langle 0|c^\dagger = 0 .$$

Evident, ea este o stare proprie trivială a operatorului număr, în sensul

$$N|0\rangle = 0\,|0\rangle ,$$

iar valoarea medie a energiei în această stare,

$$\langle 0|H|0\rangle = \frac{1}{2}\omega_0 ,$$

este chiar *energia de zero*. Evaluată pe starea fundamentală, relaţia de comutare a operatorilor c, $c^\dagger$ devine

$$cc^\dagger|0\rangle = |0\rangle$$

şi, aplicând în stânga operatorul $c^\dagger$, obţinem

$$N\left(c^\dagger|0\rangle\right) = 1\,c^\dagger|0\rangle ,$$

adică $c^\dagger|0\rangle$ este o stare proprie a lui N, de valoare proprie (număr de excitare) $n = 1$, ceea ce ne permite să scriem

$$N|1\rangle = n|1\rangle = |1\rangle ,$$

cu

$$c^\dagger|0\rangle = |1\rangle \;\Leftrightarrow\; \langle 0|c = \langle 1|$$

drept primă stare excitată. Utilizând-o în relaţia de comutare pe starea fundamentală, obţinem

$$c|1\rangle = |0\rangle \;\Leftrightarrow\; \langle 1|c^\dagger = \langle 0| ,$$

adică avem definită şi acţiunea operatorilor c, $c^\dagger$ la dreapta şi, respectiv, la stânga, asupra ei. În plus, din

$$1 = \langle 0|0\rangle = \langle 0|\left(cc^\dagger - c^\dagger c\right)|0\rangle = \langle 0|cc^\dagger|0\rangle = \left(\langle 0|c\right)\left(c^\dagger|0\rangle\right) = \langle 1|1\rangle$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

deducem că starea de primă excitaţie este, de asemenea, normată la unitate. Aplicând din nou algebra operatorilor de mişcare, dar pe starea $|1\rangle$, de această dată, avem

$$cc^\dagger|1\rangle - c^\dagger c|1\rangle = |1\rangle \;\Rightarrow\; cc^\dagger|1\rangle - c^\dagger|0\rangle = |1\rangle\,,$$

adică

$$cc^\dagger|1\rangle = 2\,|1\rangle\,.$$

"Venind" din nou din stânga cu operatorul $c^\dagger$, rezultă

$$N\left(c^\dagger|1\rangle\right) = 2\,c^\dagger|1\rangle\,,$$

obţinând următoarea stare proprie

$$c^\dagger|1\rangle = \beta_1|2\rangle \;\Leftrightarrow\; \langle 1|c = \beta_1^*\langle 2|$$

a operatorului număr de excitare, corespunzătoare valorii proprii $n = 2$. Cum

$$\langle 1|cc^\dagger|1\rangle = (\langle 1|c)\left(c^\dagger|1\rangle\right) = |\beta_1|^2\langle 2|2\rangle = 2\,\langle 1|1\rangle = 2$$

rezultă că normarea (la unitate) a celei de a doua stări excitate reclamă "automat" (până la un factor de fază neesenţial)

$$\beta_1 = \sqrt{2}\,.$$

Acum avem definite acţiunile

$$c^\dagger|1\rangle = \sqrt{2}\,|2\rangle \;\Leftrightarrow\; \langle 1|c = \sqrt{2}\,\langle 2|$$
$$c|2\rangle = \sqrt{2}\,|1\rangle \;\Leftrightarrow\; \langle 2|c^\dagger = \sqrt{2}\,\langle 1|$$

ale operatorilor c, $c^\dagger$ la stânga şi la dreapta pe prima stare excitată şi, respectiv, la dreapta şi la stânga pe cea de a doua (stare excitată). Continuând din aproape în aproape acest procedeu, este clar că vom obţine toate stările proprii ortonormale $\{|n\rangle\}_{n=0,1,2,\ldots}$

$$N|n\rangle = n|n\rangle\,,\;\; \langle n'|n\rangle = \delta_{n'n}\,,\;\; (\forall)\, n', n \in \mathbf{N}$$

corespunzătoare valorilor proprii $n = 0,\, 1,\, 2,\, \ldots$, care sunt şi stări proprii ale hamiltonianului

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle\,,$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

pentru valorile proprii

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\omega_0$$

ale energiei. Cu acestea, problema cuantificării oscilatorului liniar armonic în imagine Heisenberg este aproape complet rezolvată. Mai avem de obţinut forma concretă a acţiunii operatorilor de mişcare asupra unei stări proprii oarecare, $|n\rangle$. Este clar că operatorul c reduce cu o unitate gradul de excitare a stării asupra căreia acţionează, adică

$$c|n\rangle = \alpha_n|n-1\rangle \;\Leftrightarrow\; \langle n|c^\dagger = \alpha_n\langle n-1|$$

şi, din acest motiv, poartă numele de *operator de coborâre*, (în terminologia din limba engleză, *lowering operator*). Pe de altă parte, operatorul $c^\dagger$, mărind gradul de excitare cu o unitate,

$$c^\dagger|n\rangle = \beta_n|n+1\rangle \;\Leftrightarrow\; \langle n|c = \beta_n\langle n+1|\,,$$

a primit numele de *operator de ridicare* (*rising operator*). Forma coeficienţilor $\{\alpha_n\}_{n=0,1,2,\ldots}$ se determină imediat din ecuaţia de vectori şi valori proprii a operatorului de număr

$$N|n\rangle = n|n\rangle \;\Rightarrow\; \langle n|c^\dagger c|n\rangle = n\,,$$

adică

$$\left(\langle n|c^\dagger\right)(c|n\rangle) = \alpha_n^2 = n \;\Rightarrow\; \alpha_n = \sqrt{n}\,,\;\; (\forall)\, n \in \mathbf{N}$$

deci, pentru operatorul c, avem expresia concretă a acţiunii sale

$$c|n\rangle = \sqrt{n}\,|n-1\rangle \;\Rightarrow\; \langle n|c^\dagger = \sqrt{n}\,\langle n-1|\,.$$

Pentru coeficienţii $\{\beta_n\}_{n=0,1,2,\ldots}$ obţinem, din valoarea medie pe starea $|n\rangle$ a algebrei celor doi operatori (de mişcare),

$$\langle n|cc^\dagger|n\rangle - \langle n|c^\dagger c|n\rangle = 1 \;\Rightarrow\; \left(\langle n|c\right)\left(c^\dagger|n\rangle\right) = n+1\,,$$

adică

$$\beta_n = \sqrt{n+1}\,,\;\; (\forall)\, n \in \mathbf{N}$$

deci operatorul de ridicare acţionează după regula

$$c^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}\,|n+1\rangle \;\Leftrightarrow\; \langle n|c = \sqrt{n+1}\,\langle n+1|\,.$$

ECU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

În încheiere, să mai punctăm un aspect legat de *reprezentarea de configuraţie*, în imagine Schrödinger, a stărilor proprii ortonormale $\{|n\rangle\}_{n=0,1,2,...}$ pe care le-am introdus şi de care ne-am folosit până acum. Deoarece la $t = 0$ cele două imagini coincid, vom avea

$$x(0) = x \, , \; p(0) = -i \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}$$

de unde, utilizând expresiile lui x şi p în funcţie de c şi $c^\dagger$, rezultă sistemul

$$\begin{aligned} c + c^\dagger &= \sqrt{2\, m\, \omega_0}\, x \\ c - c^\dagger &= \sqrt{\frac{2}{m\omega_0}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \, , \end{aligned}$$

cu soluţiile

$$\begin{aligned} c &= \frac{1}{\sqrt{2m\omega_0}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \sqrt{\frac{m\omega_0}{2}}\, x \\ c^\dagger &= -\frac{1}{\sqrt{2m\omega_0}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \sqrt{\frac{m\omega_0}{2}}\, x \, , \end{aligned}$$

exprimând forma concretă a operatorilor de coborâre–ridicare în reprezentarea de configuraţie. Cum toate stările excitate $|n\rangle$ ($n \in \mathbf{N}^*$) se obţin din starea fundamentală $|0\rangle$ prin aplicarea repetată a operatorului de ridicare, iar spectrul valorilor proprii ale energiei oscilatorului este cel corect, rezultă că este suficient să se demonstreze că starea $|0\rangle$ anihilată de operatorul c este, într-adevăr, gaussiana de bază a oscilatorului liniar armonic. Din izomorfismul $|0\rangle \sim \psi_0(x)$, forma operatorului de coborâre, în reprezentare de configuraţie, şi condiţia $c|0\rangle = 0$, rezultă ecuaţia

$$\frac{\mathrm{d}\psi_0(x)}{\mathrm{d}x} + m\, \omega_0\, x\, \psi_0(x) = 0 \, ,$$

cu soluţia generală

$$\psi_0(x) = \mathcal{N}\, e^{-\frac{1}{2} m \omega_0 x^2} \, .$$

Impunând condiţia de normare

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_0(x)|^2 \, dx = 1 \, ,$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

obţinem (până la un factor de fază neesenţial)

$$\mathcal{N} = \left(\frac{m\,\omega_0}{\pi}\right)^{1/4},$$

astfel încât am demonstrat că

$$\psi_0(x) = \left(\frac{m\,\omega_0}{\pi}\right)^{1/4} e^{-\frac{1}{2}m\omega_0 x^2}$$

exprimă cu adevărat, în reprezentarea de coordonată, starea fundamentală $|0\rangle$ (de normă unitate) a oscilatorului cuantic nerelativist. Celelalte funcţii de amplitudine $\{\psi_n\}_{n\in\mathbf{N}^*}$, ale stărilor sistemului în imagine Schrödinger, se vor obţine din aproape în aproape, în baza ecuaţiei

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\, c^\dagger |n-1\rangle\,,$$

adică

$$\psi_n(x) = -\frac{1}{\sqrt{n}}\left[\frac{1}{\sqrt{2m\,\omega_0}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - \sqrt{\frac{m\,\omega_0}{2}}\,x\right]\psi_{n-1}(x)\,,\ (\forall)\ n\in\mathbf{N}^*\,.$$

Ce concluzii şi, în acelaşi timp, idei generalizatoare putem desprinde din exemplul tocmai prezentat? Prima este aceea că ecuaţiile canonice ale lui Hamilton rămân valabile, când trecem la cuantificare, dar trebuie în mod necesar "suplimentate" cu relaţiile Heisenberg de comutare a variabilelor – de fapt, a observabilelor – canonic conjugate. Datorită echivalenţei formalismului hamiltonian cu cel lagrangeian, rezultă că şi ecuaţiile Euler–Lagrange rămân valabile, dar soluţiile acestora trebuie interpretate ca operatori şi nu ca funcţii, fiindcă altfel nu pot fi satisfăcute relaţiile Heisenberg. În aceeaşi ordine de idei, putem presupune că observabilele fundamentale ale sistemului, în sens (foarte) general, se vor exprima în termeni de operatori de tip ridicare–coborâre, ce vor acompania modurile de frecvenţă negativă, respectiv pozitivă, ale câmpului (asociat sistemului) şi care vor contribui atât la stabilirea stării fundamentale (de vid, cum i se spune în Teoria Cuantică a Câmpurilor), cât şi la generarea stărilor excitate, multiparticulă, ale câmpului cuantificat. În absenţa interacţiunilor, hamiltonianul va fi o constantă a mişcării, deci toate stările sale proprii, multiparticulă, inclusiv starea de vid, vor forma în spaţiul Hilbert abstract, numit spaţiu Fock, o bază ortonormală extrem de convenabilă pentru descrierea

"conţinutului în particule" al diverselor stări cuantice ale sistemului. Ajungem, astfel, la necesitatea soluţionării principalei probleme din cadrul celei de a doua cuantificări şi anume: forma concretă a relaţiilor Heisenberg în cazul unui sistem cu un număr infinit de grade de libertate [13].

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Partea IV

A DOUA CUANTIFICARE

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Cuprins

IV A DOUA CUANTIFICARE 321

9 Simetrii 325
9.1 Simetrii externe 325
9.1.1 Grupul Lorentz 326
9.1.2 Grupul Poincaré 328
9.2 Simetrii interne 331
9.2.1 Simetrii interne globale 331
9.2.2 Simetrii interne locale 335
9.3 Câmpuri materiale. Legi de transformare 339

10 Elemente de teoria cuantică a câmpurilor 345
10.1 Interacţiuni electromagnetice 345
10.1.1 Regulile Feynman pentru particulele scalare 345
10.1.2 Secţiunea de împrăştiere şi rata de dezintegrare 350
10.1.3 Regulile Feynman pentru fermioni 355
10.2 Fermionii în Modelul Weinberg–Salam 357
10.2.1 Sectorul leptonic 363
10.2.2 Sectorul quark-urilor 365
10.3 Dezintegrarea leptonului μ 367

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Capitolul 9

Simetrii

9.1 Simetrii externe

Simetriile unei teorii se exprimă prin invarianţa acesteia în raport cu diferite grupuri de transformări şi sunt de două tipuri [7, 12, 13, 41, 51]:

(i) simetrii externe, implicând direct coordonatele spaţio-temporale, în raport cu grupurile Lorentz şi Poincaré, având drept consecinţă legile de conservare a energiei, a impulsului şi a momentului cinetic;

(ii) simetriile interne, globale sau locale, faţă de grupuri unitare de tip $SU(N)$ şi $U(1)$, ce acţionează ca "transformări de fază" generalizate asupra funcţiilor de undă [42].

Grupurile din a doua categorie sunt compacte, adică elementele lor se exprimă în funcţie de un număr de parametri esenţiali ce variază într-un interval finit de valori, în timp ce grupurile simetriilor spaţio-temporale sunt necompacte, domeniul de variaţie al parametrilor fiind, practic, infinit. Din acest motiv, este imposibilă găsirea unui grup general, mai larg – a unui *Master Group* – ale cărui subgrupuri să fie toate cele menţionate mai sus. Unificarea grupurilor compacte şi necompacte, interzisă de teorema Coleman–Mandula şi de alte teoreme *No-Go*, şi-a găsit o rezolvare prin elaborarea, după 1970, a supersimetriei [21], care, deşi lipsită de o confirmare experimentală, este considerată de specialişti ca o nouă simetrie a naturii. Ea lucrează cu un formalism specific, dezvoltat în spaţiul multi-dimensional denumit *superspaţiu*, a cărui detaliere depăşeşte cadrul lucrării de faţă [21].

BUCHAREST CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

9.1.1 Grupul Lorentz

Grupul Lorentz se defineşte ca fiind grupul matricelor $\Lambda_{4\times 4}$, care transformă coordonatele spaţio-temporale $\{x^i\}_{i=\overline{1,4}} = (\vec{x}, x^4)$, lăsând invariantă expresia

$$x_i\, x^i = x'_i\, x'^i\,, \tag{9.1}$$

adică

$$\eta_{ij}\, x^i\, x^j = \eta_{kl}\, x'^k\, x'^l\,, \tag{9.2}$$

unde

$$\eta_{ij} = \mathrm{diag}\,[1, 1, 1, -1]\,. \tag{9.3}$$

Impunând transformărilor liniare

$$x'^k = \Lambda^k_{\cdot i}\, x^i \tag{9.4}$$

relaţia (9.2), găsim că matricele Λ au proprietatea

$$\eta_{ij} = \Lambda^k_{\cdot i}\, \eta_{kl}\, \Lambda^l_{\cdot j}\,, \tag{9.5}$$

sau, în exprimare matriceală,

$$\eta = \Lambda^T \eta \Lambda\,, \tag{9.6}$$

din care rezultă imediat că

$$(\det \Lambda)^2 = 1\,, \quad \text{sau} \quad \det \Lambda = \pm 1\,, \tag{9.7}$$

şi

$$\left(\Lambda^4_{\cdot 4}\right)^2 \geq 1\,, \quad \text{sau} \quad |\Lambda^4_{\cdot 4}| \geq 1\,. \tag{9.8}$$

Prin analogie cu grupurile ortogonale, generând rotaţii în două sau trei dimensiuni şi notate cu $O(2)$ şi, respectiv, $O(3)$, vom utiliza pentru grupul Lorentz (general) notaţia $O(3,1)$. Relaţiile (9.7) şi (9.8) pun în evidenţă următoarele subgrupuri de interes:

(i) grupul Lorentz propriu

$$L_+ = \{\Lambda \in O(3,1) \,|\, \det \Lambda = 1\}\,, \tag{9.9}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

(ii) grupul Lorentz ortocron

$$L^{\uparrow} = \left\{ \Lambda \in O(3,1) \,|\, \Lambda_4^4 \geq 1 \right\} , \tag{9.10}$$

(iii) grupul Lorentz propriu ortocron

$$L_+^{\uparrow} = \left\{ \Lambda \in O(3,1) \,|\, \det \Lambda = 1 \,,\; \Lambda_4^4 \geq 1 \right\} . \tag{9.11}$$

După cum am menţionat în paragraful 3.2.3, aplicaţia exponenţială

$$g = \exp[iX] \tag{9.12}$$

face legătura între grupul Lie şi algebra asociată acestuia, X fiind de forma

$$X = \theta^a T_a \,, \tag{9.13}$$

unde $\{\theta^a\}_{a=\overline{1,n}}$ sunt parametrii infinitezimali esenţiali ai algebrei n dimensionale, iar $\{T_a\}_{a=\overline{1,n}}$ sunt generatorii acesteia, satisfăcând relaţiile de comutatori (3.80).

Elementele grupului Lorentz, exprimate infinitezimal prin

$$\Lambda^{ij} = \eta^{ij} + \omega^{ij} + \mathcal{O}(\omega^2) \tag{9.14}$$

conduc, prin înlocuirea în (9.5), la concluzia că parametrii esenţiali ai grupului, ω^{ij}, sunt antisimetrici,

$$\omega^{ij} = -\omega^{ji} \,, \tag{9.15}$$

adică grupul Lorentz este un grup Lie 6-parametric, a cărui algebră Lie asociată va avea şase generatori. Astfel, relaţia (9.12) se scrie sub forma

$$\Lambda = \exp\left(\frac{i}{2} \omega^{ij} L_{ij} \right) , \tag{9.16}$$

în care am introdus generatorii $\{L_{ij}\}_{i,j=\overline{1,4}}$ (în număr de $C_4^2 = 6$, datorită proprietăţii $L_{ij} = -L_{ji}$), de tip moment cinetic orbital, adică

$$L_{ij} = x_i p_j - x_j p_i = -i \left(x_i \partial_j - x_j \partial_i \right) , \tag{9.17}$$

şi satisfăcând relaţiile de comutare

$$\left[L^{ij} \,,\, L^{kl} \right] = i \left(\eta^{ik} L^{jl} - \eta^{il} L^{jk} - \eta^{jk} L^{il} + \eta^{jl} L^{ik} \right) . \tag{9.18}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

La aceştia se pot adăuga operatorii de spin, notaţi cu $\{S_{ij}\}$, comutând cu $\{L_{ij}\}$ şi satisfăcând aceeaşi algebră. Prin urmare, putem utiliza ca generatori ai algebrei Lorentz fie momentele cinetice totale

$$M_{ij} = L_{ij} + S_{ij}\,, \tag{9.19}$$

ce satisfac, evident,

$$\left[M^{ij}, M^{kl}\right] = i\left(\eta^{ik}M^{jl} - \eta^{il}M^{jk} - \eta^{jk}M^{il} + \eta^{jl}M^{ik}\right)\,, \tag{9.20}$$

fie operatorii

$$\begin{aligned} J^{\mu} &= \frac{1}{2}\,\varepsilon^{\mu\alpha\beta}M_{\alpha\beta} \\ K^{\mu} &= M^{\mu 4}\,, \end{aligned} \tag{9.21}$$

cu algebra corespunzătoare

$$\begin{aligned} [J^{\mu}\,, J^{\nu}] &= i\,\varepsilon^{\mu\nu\alpha}J^{\alpha} \\ [K^{\mu}\,, K^{\nu}] &= -i\,\varepsilon^{\mu\nu\alpha}J^{\alpha} \\ [J^{\mu}\,, K^{\nu}] &= i\,\varepsilon^{\mu\nu\alpha}K^{\alpha}\,. \end{aligned} \tag{9.22}$$

După cum se poate observa din primele două relaţii (9.22), în timp ce $\{J^{\mu}\}_{\mu=\overline{1,3}}$ sunt, într-adevăr, generatorii grupului de rotaţii $SO(3)$, satisfăcând (faţă de grupul Lorentz $SO(3,1)$ sub-)algebra (3.109), generatorii $\{K^{\mu}\}_{\mu=\overline{1,3}}$, asociaţi transformărilor denumite *boosts*, nu închid o (sub)algebră (a lor), deoarece două boost-uri succesive, pe direcţii ortogonale, produc o rotaţie generalizată (fiindcă include şi spinul), generată de J, în loc să conducă la un alt boost sau, mai general, la o combinaţie liniară de boost-uri. Numai împreună cu $\{J^{\mu}\}_{\mu=\overline{1,3}}$, după cum se poate vedea din ultima relaţie (9.22), generatorii de boost $\{K^{\nu}\}_{\nu=\overline{1,3}}$, închid univoc algebra grupului Lorentz, $SO(3,1)$.

9.1.2 Grupul Poincaré

Grupul Poincaré este definit ca fiind grupul tuturor transformărilor de coordonate ce lasă invariantă metrica Minkowski (9.3), adică $\eta_{ik}dx'^{i}dx'^{k} = ds^2 = \eta_{lm}dx^{l}dx^{m}$, de unde rezultă

$$x'^{i} = \Lambda^{i}_{\cdot j}\,x^{j} + a^{i}\,,\ \text{cu}\ da^{i} = 0 \Leftrightarrow a^{i} = (const.)^{i} \neq 0\,, \tag{9.23}$$

BIBLIOTECA CENTRALĂ UNIVERSITY LIBRARY

unde, prima parte a membrului drept o reprezintă "rotaţiile Lorentz", iar a doua parte, translaţiile spaţio-temporale. Grupul Poincaré are zece parametri infinitezimali esenţiali şi anume cei şase, antisimetrici, de rotaţie, $\{\omega^{ij}\}$ şi patru de translaţie, $\{a^i\}$. În consecinţă, algebra Poincaré este 10-dimensională şi este generată de operatorii $\{M_{ij}\,,\,P_i\}$, cu $P_i = -i\partial_i$ asociaţi translaţiilor, satisfăcând relaţiile de comutatori

$$\begin{aligned}
[M_{ij}\,,\,M_{kl}] &= i\,(\eta_{ik}M_{jl} - \eta_{il}M_{jk} - \eta_{jk}M_{il} + \eta_{jl}M_{ik}) \\
[M_{ij}\,,\,P_k] &= i\,(\eta_{ik}P_j - \eta_{jk}P_i) \\
[P_i\,,\,P_j] &= 0\,.
\end{aligned} \tag{9.24}$$

Pentru a construi reprezentările unui grup Lie, ne sunt necesari acei operatori ce comută cu toţi generatorii algebrei Lie asociate grupului. După cum am menţionat în paragraful 3.2.3, în cazul grupurilor $SU(N)$, de dimensiune N^2-1 şi rang $r = N-1$, există operatori care comută cu toţi generatorii, fără a fi, însă, generatori, numiţi *operatori Casimir*. Astfel, pentru grupul $SO(3)$ (S provine de la *special*, adică cu determinantul 1), fiecare din cei trei generatori $\{J_\mu\}_{\mu=\overline{1,3}}$ poate constitui baza unei subalgebre Cartan monodimensionale. Practic, ne-am fixat asupra lui J_z şi, adăugând operatorul Casimir $\vec{J}^2$, vom putea caracteriza reprezentările grupului $SO(3)$ prin valorile proprii ale acestor doi operatori.

În cazul grupului Poincaré, se poate demonstra că $P_iP^i = -m_0^2$ şi pătratul operatorului

$$W^i = -\frac{1}{2}\varepsilon^{ijkl}P_jM_{kl}\,,\ \text{cu}\ \varepsilon^{1234} = +1\,, \tag{9.25}$$

denumit *operatorul Pauli–Ljubanski*, sunt cei doi operatori Casimir. În referenţialul propriu al particulei de masă m_0 şi spin s, vom avea

$$W^i = -\frac{1}{2}\varepsilon^{i4jk}P_4S_{jk} = \frac{m_0}{2}\varepsilon^{ijk4}\,S_{jk}\,,$$

adică

$$\begin{aligned}
W^\mu &= \frac{m_0}{2}\varepsilon^{\mu\alpha\beta}S_{\alpha\beta} = m_0\,S^\mu \\
W^4 &= 0\,,
\end{aligned} \tag{9.26}$$

unde S^μ este chiar operatorul de spin şi astfel, valorile proprii ale lui W_iW^i sunt

$$W_iW^i = W^\mu W^\mu = m_0^2 s(s+1)\,, \tag{9.27}$$

SCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

acest rezultat fiind, evident, un invariant relativist.

Deci, într-o reprezentare, stările corespunzătoare particulelor de masă $m_0 > 0$ şi spin s, având $2s+1$ componente, vor fi indexate prin valorile proprii ale operatorilor Casimir, sub forma $|m_0, s\rangle$, cu $s = 0, 1/2, 1, \ldots$.

Un caz aparte îl constituie câmpurile de masă nulă, categorie din care fac parte fotonul ($s = 1$) şi neutrino ($s = 1/2$), pentru care, pe lângă $W^i P_i = 0$, avem şi $P^2 = -m_0^2 \equiv 0$ care implică $W^2 \stackrel{\Delta}{=} W^i W_i \equiv 0$. Aceste relaţii nu pot fi satisfăcute simultan decât dacă cei doi operatori sunt proporţionali, adică

$$W_i = h\, P_i \,, \tag{9.28}$$

constanta de proporţionalitate, notată cu h (a nu se confunda cu constanta lui Planck) fiind denumită *elicitate* (*helicity*). Astfel, pentru particulele de masă nulă, vom avea numai **două** stări, corespunzătoare cazurilor în care W_i este paralel şi, respectiv, antiparalel cu P_i. Într-adevăr, din

$$W^4 \stackrel{(9.28)}{=} h(\vec{P}) \stackrel{(9.25)}{=} \frac{1}{2}\varepsilon^{\alpha\beta\gamma 4} P_\alpha M_{\beta\gamma} \stackrel{(9.25)}{=} J^\alpha P_\alpha = \vec{J}\cdot\vec{P}$$

rezultă elicitatea

$$h = \frac{\vec{J}\cdot\vec{P}}{|\vec{P}|}\,, \tag{9.29}$$

care este **pozitivă** pentru $\vec{P}$ **paralel** cu $\vec{J}$ (adică aceeaşi direcţie şi acelaşi sens pentru vectorii $\vec{P}$, $\vec{J}$) şi, respectiv, **negativă** pentru $\vec{P}$ **antiparalel** cu $\vec{J}$ (adică aceeaşi direcţie, dar sensuri opuse). Cum operatorul Pauli–Ljubanski este un pseudovector – din cauza tensorului *complet antisimetric* ε – rezultă că, în ceea ce priveşte numerotarea stărilor liniar independente sub acţiunea operatorului de paritate, pentru particulele cu $m_0 = 0$, vom avea – idependent de spinul acestora – numai două stări distincte, de elicitate $\pm|h|$.

Încheiem acest paragraf prin a face observaţia că, în mod remarcabil, se pot indexa toate reprezentările ireductibile ale grupului Poincaré (adică toate câmpurile fizice din Univers) prin valorile proprii ale operatorilor Casimir asociaţi acestuia, aşa cum rezultă din tabelul următor:

$$\begin{cases} P^2 < 0\,; & |m, s\rangle,\ s = 0,\ 1/2,\ 1,\ 3/2, \ldots \\ P^2 = 0\,; & |h\rangle,\ h = \pm s \\ P^2 = 0\,; & \text{cu } s \text{ continuu} \\ P^2 > 0\,; & \textit{tachyon}\,. \end{cases}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

În natură, spectrul stărilor fizice se realizează numai penru primele două categorii, cu $P^4 > 0$. Celelalte stări, corespunzătoare variaţiei continue a spinului sau tachyon-ului, nefiind observate până în prezent.

9.2 Simetrii interne

Simetriile interne, prezentate succint, într-un limbaj "natural" oferit de teoria grupurilor Lie, în paragraful 3.2.3 al acestei lucrări, sunt de două categorii: *globale* şi *locale*, după cum parametrii esenţiali ai grupului sunt *constanţi* sau *dependenţi de coordonate.*

9.2.1 Simetrii interne globale

Pentru un câmp fizic oarecare, plecăm de la densitatea de lagrangeian $\mathcal{L}[\Phi^\dagger, \Phi]$, construim lagrangeianul

$$L = \int \mathcal{L}[\Phi^\dagger, \Phi]\, d\vec{x} \tag{9.30}$$

şi impunem acţiunii S condiţia de extrem (7.51). După aplicarea ecuaţiilor Euler-Lagrange, punem în evidenţă anularea unei 4-divergenţe, anume

$$\partial_i \left[\delta\Phi^\dagger \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i \Phi^\dagger)} + \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i \Phi)} \delta\Phi \right] = 0\,. \tag{9.31}$$

Transformările unitare

$$\begin{aligned} \Phi &\to \Phi' = e^{ig\theta^a X_a} \Phi \\ \Phi^\dagger &\to \Phi'^\dagger = \Phi^\dagger e^{-ig\theta^a X_a}\,, \end{aligned} \tag{9.32}$$

pot fi exprimate infinitezimal sub forma

$$\begin{aligned} \delta\Phi &= ig\,\theta^a X_a \Phi \\ \delta\Phi^\dagger &= -ig\,\theta^a \Phi^\dagger X_a\,, \end{aligned} \tag{9.33}$$

unde g este constanta de cuplaj, $\{\theta^a\}_{a=\overline{1,n}}$ sunt parametrii esenţiali ai grupului special unitar, iar generatorii $\{X_a\}_{a=\overline{1,n}}$ satisfac algebra (3.80). Înlocuim (9.33) în (9.31), adică

$$\theta^a\, \partial_i \left[ig \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i \Phi)} X_a \Phi - \Phi^\dagger X_a \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_i \Phi^\dagger)} \right) \right] = 0\,, \tag{9.34}$$

BIBLIOTECA CENTRALĂ UNIVERSITY LIBRARY

şi obţinem (parametrii fiind liniar independenţi) legea de conservare

$$\partial_i J_a^i = 0 \tag{9.35}$$

a cuadricurenţilor

$$J_a^i = ig\left[\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_i\Phi)}X_a\Phi - \Phi^\dagger X_a\frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_i\Phi^\dagger)}\right]. \tag{9.36}$$

Sarcinile asociate

$$Q_a = \int J_a^4\, d\vec{x} \tag{9.37}$$

vor satisface, la rândul lor, algebra (3.80).

Să considerăm grupul $SU(2)$, cu algebra asociată (3.86, 139), şi Ψ dubletul spinorial de izospin, de tipul (3.138), descris de densitatea de lagrangeian (8.121), pentru $m = 0$, adică

$$\mathcal{L} = \bar{\Psi}\gamma^i\partial_i\Psi = \sum_{A=1}^{2}\bar{\psi}_A\gamma^i\partial_i\psi^A\,. \tag{9.38}$$

Pentru $X^a = \frac{\sigma^a}{2}$, transformările (9.33) devin

$$\begin{aligned}\delta\psi^A &= i\frac{g}{2}\vec{\theta}\cdot\vec{\sigma}_B^A\,\psi^B\\ \delta\psi_A^\dagger &= -i\frac{g}{2}\psi_B^\dagger\vec{\theta}\cdot\vec{\sigma}_A^B\end{aligned} \tag{9.39}$$

şi ne conduc la curenţii

$$V_\mu^i = i\frac{g}{2}\bar{\psi}_A\gamma^i(\sigma_\mu)_B^A\psi^B = i\frac{g}{2}\bar{\Psi}\gamma^i\sigma_\mu\Psi\,, \tag{9.40}$$

cu sarcinile

$$Q_\mu = \int V_\mu^4\, d\vec{x}\,, \tag{9.41}$$

generând o algebră $\mathcal{SU}(2)$, adică (3.86). O altă transformare care lasă invariantă densitatea de lagrangeian este

$$\delta\psi^A = i\frac{g}{2}\vec{\theta}\cdot\vec{\sigma}_B^A\,\gamma^5\psi^B\,, \tag{9.42}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

împreună cu conjugata sa hermitică, cărora le sunt asociaţi curenţii

$$A^i_\mu = i\frac{g}{2}\bar{\psi}_A\gamma^i\gamma^5(\sigma_\mu)^A_B\psi^B = i\frac{g}{2}\bar{\Psi}\gamma^i\gamma^5\sigma_\mu\Psi\,, \tag{9.43}$$

ale căror sarcini,

$$Q^5_\mu = \int A^4_\mu\, d\vec{x}\,, \tag{9.44}$$

nu închid o algebră $\mathcal{SU}(2)$. O analiză mai atentă a relaţiilor de comutatori

$$\begin{aligned}
[Q_\mu, Q_\nu] &= i\varepsilon_{\mu\nu\eta}Q^\eta \\
\left[Q_\mu, Q^5_\nu\right] &= i\varepsilon_{\mu\nu\eta}Q^{5\eta} \\
\left[Q^5_\mu, Q^5_\nu\right] &= i\varepsilon_{\mu\nu\eta}Q^\eta\,,
\end{aligned} \tag{9.45}$$

ne sugerează combinaţiile *left* şi *right*

$$\begin{aligned}
Q^\mu_L &= \frac{1}{2}\left(Q^\mu - Q^{5\mu}\right) \\
Q^\mu_R &= \frac{1}{2}\left(Q^\mu + Q^{5\mu}\right),
\end{aligned} \tag{9.46}$$

ce satisfac relaţiile

$$\begin{aligned}
[Q^\mu_L, Q^\nu_L] &= i\varepsilon^{\mu\nu\eta}Q_{\eta L} \\
[Q^\mu_R, Q^\nu_R] &= i\varepsilon^{\mu\nu\eta}Q_{\eta R} \\
[Q^\mu_L, Q^\nu_R] &= 0\,,
\end{aligned} \tag{9.47}$$

şi generează produsul direct $SU(2)_L \times SU(2)_R$. Am pus astfel în evidenţă o separare a algebrei iniţiale în două subalgebre generate de curenţii *left-handed* $J^\mu = V^\mu - A^\mu$ şi *right-handed* $J^\mu = V^\mu + A^\mu$, fapt ce conferă teoriei proprietatea de *chiralitate*.

Pentru a separa spinorii după elicitate, în componente *left* şi *right*, vom utiliza matricele γ^i în *reprezentarea Weyl*, numită şi *reprezentare chirală*, anume

$$\begin{aligned}
\gamma^\mu &= \gamma_\mu = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma^\mu \\ i\sigma^\mu & 0 \end{pmatrix} \\
\gamma^4 &= -\gamma_4 = i\beta_W\,, \text{ cu } \beta_W = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{9.48}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

cu proprietăţile (8.98). În reprezentarea Weyl, matricea γ^5, definită prin (8.105), are forma bloc-diagonală

$$\gamma^5 = -i\gamma^1\gamma^2\gamma^3\gamma^4 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{9.49}$$

şi ne permite construirea *operatorilor de proiecţie*

$$\begin{aligned} P_R &= \frac{1}{2}(1+\gamma^5)\,; \\ P_L &= \frac{1}{2}(1-\gamma^5)\,. \end{aligned} \tag{9.50}$$

În acest caz, lagrangeianul (9.38) ne conduce la ecuaţia

$$\gamma^i \partial_i \psi = 0 \tag{9.51}$$

sau, efectuând înlocuirea $p^i \to -i\partial_i$, la ecuaţia

$$\left(\gamma^\mu p^\mu - \gamma^4 E\right)\psi = 0\,. \tag{9.52}$$

De aici, pentru bispinorul

$$\psi = \begin{pmatrix} \xi \\ \chi \end{pmatrix}, \tag{9.53}$$

obţinem sistemul de ecuaţii decuplate

$$\begin{aligned} (\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\,\xi &= E\,\xi \\ (\vec{\sigma}\cdot\vec{p})\,\chi &= -E\,\chi, \end{aligned} \tag{9.54}$$

în care particula de elicitate pozitivă $\left(h = \frac{1}{2}\right)$, descrisă de

$$\frac{\vec{S}\cdot\vec{p}}{|\vec{p}|}\,\xi = \frac{1}{2}\xi \tag{9.55}$$

şi numită spinor Weyl *right-handed*, s-a separat de cea cu elicitate negativă, $\left(h = -\frac{1}{2}\right)$, descrisă de

$$\frac{\vec{S}\cdot\vec{p}}{|\vec{p}|}\,\chi = -\frac{1}{2}\chi \tag{9.56}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi numită spinor Weyl *left-handed* [47].

Separarea spinorilor după elicitate este absolut necesară în teoriile ce conţin particula *neutrino*, deoarece aceasta are numai elicitate negativă, iar curenţii (9.40) şi (9.43) vor apărea în combinaţii de tipul $J^i = V^i - A^i$ şi $J^i = V^i + A^i$. Notaţiile V şi A, utilizate pentru curenţi, provin de la caracterul acestora de curenţi *vectoriali* şi, respectiv, *axiali*. Un curent de tip vectorial se transformă sub acţiunea operatorului de paritate ca un vector, adică

$$\begin{aligned} P &: V^\mu \to -V^\mu \\ P &: V^4 \to V^4 \ , \end{aligned} \tag{9.57}$$

iar unul de tip axial se transformă ca un pseudovector, adică

$$\begin{aligned} P &: A^\mu \to A^\mu \\ P &: A^4 \to -A^4 . \end{aligned} \tag{9.58}$$

În cazul nostru, operatorul de paritate fiind

$$P = \beta_W = -i\gamma^4 , \tag{9.59}$$

funcţiile de undă devin

$$\psi(-h) = -i\gamma^4\psi(h) \ ; \ \bar{\psi}(-h) = -i\bar{\psi}\gamma^4 . \tag{9.60}$$

Curenţii (9.40) se transformă după legea

$$\begin{aligned} \bar{\psi}(-h)\gamma^\mu\psi(-h) &= -\bar{\psi}(h)\gamma^4\gamma^\mu\gamma^4\psi(h) = -\bar{\psi}(h)\gamma^\mu\psi(h) \\ \bar{\psi}(-h)\gamma^4\psi(-h) &= -\bar{\psi}(h)\gamma^4\gamma^4\gamma^4\psi(h) = \bar{\psi}(h)\gamma^4\psi(h), \end{aligned} \tag{9.61}$$

adică sunt de tip vectorial, în timp ce (9.43) sunt de tip axial, transformându-se după legea

$$\begin{aligned} \bar{\psi}(-h)\gamma^\mu\gamma^5\psi(-h) &= -\bar{\psi}(h)\gamma^4\gamma^\mu\gamma^5\gamma^4\psi(h) = \bar{\psi}(h)\gamma^\mu\psi(h) \\ \bar{\psi}(-h)\gamma^4\gamma^5\psi(-h) &= -\bar{\psi}(h)\gamma^4\gamma^4\gamma^5\gamma^4\psi(h) = -\bar{\psi}(h)\gamma^4\gamma^5\psi(h). \end{aligned} \tag{9.62}$$

9.2.2 Simetrii interne locale

Fie G grupul Lie $SU(N)$ cu algebra Lie asociată $\mathcal{SU}(N)$, ai cărei generatori, $\{T^a\}_{a=\overline{1,n}}$, satisfac relaţiile de comutare (3.80). Densitatea de lagrangeian a câmpului spinorial liber (8.121), adică

$$\mathcal{L} = \bar{\Psi}(\gamma^i\partial_i + m)\Psi , \tag{9.63}$$

rămâne invariantă la transformările globale de tipul (9.32). Situaţia se schimbă însă în cazul în care parametrii infinitezimali devin funcţii de punct, adică pentru transformări de tipul

$$\begin{aligned} \Psi(x) &\rightarrow \Psi'(x) = U(\theta(x))\Psi(x) = e^{-i\theta_a(x)X^a}\,\Psi(x) \\ \bar{\Psi}(x) &\rightarrow \bar{\Psi}'(x) = \bar{\Psi}(x)U^\dagger(\theta(x)) = \bar{\Psi}(x)e^{iX^a\theta_a(x)}\,. \end{aligned} \tag{9.64}$$

Dacă asociem, într-o reprezentare de dimensiune N, generatorilor T^a matrice pătratice, atunci cele N componente ale matricei coloană $\Psi(x)$ se transformă după legea

$$\begin{aligned} \psi^r(x) &\rightarrow \psi'^r(x) = U^r_s(\theta(x))\psi^s(x) \approx (\delta^r_s - i\,\theta_a(x)(T^a)^r_s)\,\psi^s(x) \\ \bar{\psi}_r(x) &\rightarrow \bar{\psi}'_r(x) = \bar{\psi}_s(x)U^{\dagger s}_r(\theta(x)) \approx \bar{\psi}_s(x)\,(\delta^s_r + i\,(T^a)^s_r\theta_a(x))\,, \end{aligned} \tag{9.65}$$

iar lagrangeianul Dirac capătă forma

$$\mathcal{L}' = \bar{\Psi}'\left(\gamma^i\partial_i + m\right)\Psi' = \mathcal{L} - i\bar{\Psi}\gamma^i(T^a)\Psi\partial_i\theta_a\,, \tag{9.66}$$

diferită de (9.63) prin prezenţa suplimentară a ultimului termen. Pentru a păstra invarianţa locală a lagrangeianului faţă de transformările (9.64), trebuie să înlocuim derivata obişnuită cu o derivată *gauge*-covariantă, care să se transforme după aceeaşi lege ca şi câmpul, adică

$$(D_i\Psi)' = U(\theta)D_i\Psi\,. \tag{9.67}$$

Această derivată o generalizează pe cea din electromagnetism, adică

$$D_i\Psi(x) = (\partial_i + ieA_i(x))\,\Psi(x)\,, \tag{9.68}$$

unde e este chiar sarcina electronului $e = -|e|$, iar $A_i(x)$ este câmpul electromagnetic. Pentru grupul $SU(N)$, derivata covariantă va fi de forma

$$D_i\Psi(x) = (\partial_i - igA_i(x))\,\Psi(x)\,, \tag{9.69}$$

unde g este o constantă de cuplaj caracteristică grupului de etalonare, iar A_i – denumite, în spiritul geometriei de gauge-invarianţă [13], componentele (Lorentz ale) conexiunii $SU(N)$ cu valori în algebra $\mathcal{SU}(N)$ – sunt nişte câmpuri compensatoare,

$$A_i(x) = T_aA^a_i(x)\,,\ \ a = \overline{1,n}\,, \tag{9.70}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

formate din câmpurile gauge (4-vectoriale) $A^a(x)$ – de componente Lorentz $A^a_i(x)$ – în număr egal (după $a = \overline{1,n}$) cu numărul $n = N^2 - 1$ al generatorilor şi contractate cu generatorii algebrei. Explicitând (9.67), adică

$$(\partial_i - igA'_i)\, U\Psi = U\,(\partial_i - igA_i)\,\Psi\,,$$

obţinem relaţia matriceală de transformare a câmpurilor Yang–Mills

$$A'_i = U\,A_i\,U^{-1} - \frac{i}{g}\,(\partial_i U)\,U^{-1}\,, \tag{9.71}$$

sau

$$T_a A'^a_i = U\,T_a A^a_i\,U^{-1} - \frac{i}{g}\,(\partial_i U)\,U^{-1}\,, \tag{9.72}$$

din care, dezvoltând în serie pe U şi U^{-1}, adică

$$\begin{aligned} U &\approx 1 - iT^a\theta_a + \mathcal{O}(\theta^2) \\ U^{-1} &\approx 1 + iT^a\theta_a + \mathcal{O}(\theta^2)\,, \end{aligned} \tag{9.73}$$

şi ţinând cont de relaţiile de comutare (3.80), obţinem legea infinitezimală de transformare a câmpurilor neabeliene de etalonare

$$A'^a_i = A^a_i + f^{abc}\theta_b A_{ic} - \frac{1}{g}\partial_i\theta^a\,. \tag{9.74}$$

Astfel, prin înlocuirea derivatei uzuale cu derivata $SU(N)$ *gauge*-covariantă, am adus densitatea de lagrangeian a câmpului Dirac, (9.63), la forma

$$\mathcal{L} = \bar{\Psi}(x)\left(\gamma^i D_i + m\right)\Psi(x)\,, \tag{9.75}$$

invariantă faţă de transformările locale (9.64, 74). Pentru a putea considera cele n câmpuri *gauge* ca pe nişte variabile dinamice, trebuie să adăugăm un termen cinetic conţinând derivatele acestora, de tipul celui din electromagnetism, adică

$$\mathcal{L}_{YM} = \frac{1}{4}\,\mathrm{Tr}\left[F^{ij}F_{ij}\right]. \tag{9.76}$$

Definind tensorul antisimetric de ordin doi al câmpurilor de etalonare, F^{ij}, prin următoarea combinaţie a derivatelor covariante

$$(D_iD_j - D_jD_i)\,\Psi \equiv igF_{ij}\Psi\,, \tag{9.77}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

vom obţine expresia

$$F_{ij} = \partial_i A_j - \partial_j A_i - ig\,[A_i\,,\,A_j]\,, \tag{9.78}$$

în care atât câmpurile de etalonare, cât şi *tensorul Yang–Mills*, sunt contractate cu generatorii T_a. Relaţia anterioară, scrisă sub forma

$$F_{ij} \triangleq T_a F_{ij}^a = \partial_i \left(T_a A_j^a\right) - \partial_j \left(T_a A_i^a\right) - ig\left[T_b A_i^b\,,\,T_c A_j^c\right], \tag{9.79}$$

ne conduce, după utilizarea relaţiilor de comutatori (3.80), la următoarea expresie a componentelor tensorului Yang–Mills:

$$F_{ij}^a = \partial_i A_j^a - \partial_j A_i^a + g f^{abc} A_{ib} A_{jc}\,. \tag{9.80}$$

Cu aceste rezultate, normând corespunzător trasa produsului generatorilor T_a, T_b , lagrangeianul $SU(N)$ *gauge*-invariant are forma

$$\mathcal{L} = \bar{\Psi}\left(\gamma^i D_i + m\right)\Psi + \frac{1}{4} F_{ij}^a F_a^{ij}\,, \tag{9.81}$$

sau, în mod explicit,

$$\mathcal{L} = \bar{\Psi}\left(\gamma^i \partial_i + m\right)\Psi - ig\,\bar{\Psi}\gamma^i \Psi A_i + \frac{1}{4} F_{ij}^a F_a^{ij}\,. \tag{9.82}$$

În (9.82), am pus în evidenţă, pe lângă termenul (9.63) ce descrie câmpul fermionic liber, un termen de cuplaj al curenţilor la câmpurile de etalonare şi un termen corespunzător câmpurilor *gauge* neabeliene, ce conţine numai parte cinetică şi parte de auto-interacţie, fiind lipsit de un termen de masă. În lucrările dedicate particulelor elementare, se arată că termenii de masă pentru câmpurile Yang–Mills apar ca urmare a ruperii spontane a unor simetrii locale, prin aşa-numitul *mecanism Higgs* [1, 7, 31, 51].

În încheiere, vom particulariza relaţiile obţinute la cazul grupului $U(1)$. Astfel, transformările locale de fază (9.64) au forma

$$\begin{aligned} \Psi(x) &\to \Psi'(x) = e^{-i\alpha(x)}\Psi(x) \\ \bar{\Psi}(x) &\to \bar{\Psi}'(x) = e^{i\alpha(x)}\bar{\Psi}(x)\,, \end{aligned} \tag{9.83}$$

iar termenul suplimentar al lagrangeianului Dirac va fi compensat prin înlocuirea derivatei obişnuite cu derivata covariantă (9.69), în care constanta de cuplaj este

RCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

chiar sarcina electronului, $g = -|e|$. Teoria fiind abeliană, tensorul câmpurilor *gauge* (9.78) şi transformarea câmpului *gauge*, (9.74), se reduc la formele uzuale din Electrodinamică, adică

$$F_{ij} = \partial_i A_j - \partial_j A_i \,, \tag{9.84}$$

respectiv

$$A'_i = A_i + \frac{1}{e}\,\partial_i \alpha(x) \,. \tag{9.85}$$

Expresia $U(1)$ *gauge*-invariantă a lagrangeianului Dirac, adică

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2 = \bar{\Psi}\left(\gamma^i D_i + m\right)\Psi + \frac{1}{4} F_{ij} F^{ij} \,, \tag{9.86}$$

conţine în partea fermionică, $\mathcal{L}_1$, termenul liber (9.63) şi un termen de cuplaj al curentului fermionic la câmpul electromagnetic, adică eJ_iA^i, pe care îl vom utiliza, în capitolul următor, la studiul interacţiunilor electromagnetice ale particulelor bozonice şi fermionice.

De asemenea, remarcăm absenţa, în (9.86), a unui termen de masă pentru foton, forma A_iA^i nefiind, de altfel, $U(1)$ *gauge*-invariantă.

9.3 Câmpuri materiale. Legi de transformare

În acest paragraf, vom deduce legile de transformare ale câmpurilor şi ale derivatelor acestora, în raport cu reprezentările grupului Lorentz. Într-o reprezentare oarecare, relaţia (9.16) poate fi scrisă sub forma

$$A(\Lambda) = e^{\omega^{ij} T_{ij}} \,, \tag{9.87}$$

unde A sunt matricele asociate elementelor grupului Lorentz, iar T_{ij} corespund generatorilor algebrei Lorentz. Un câmp ϕ oarecare, se transformă după relaţia generală

$$\phi'(x') = A\,\phi(x) \,, \tag{9.88}$$

a cărei reprezentare infinitezimală, pentru $A \approx 1 + \omega^{ij} T_{ij}$, este

$$\phi'(x') = \phi(x) + \omega^{ij} T_{ij}\,\phi(x) \,, \tag{9.89}$$

sau

$$\delta\phi = \omega^{ij} T_{ij}\,\phi \,. \tag{9.90}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Derivata lui (9.89), adică

$$\frac{\partial \phi'}{\partial x'^i} = \frac{\partial \phi}{\partial x^j}\frac{\partial x^j}{\partial x'^i} + \omega^{kl}T_{kl}\frac{\partial \phi}{\partial x^j}\frac{\partial x^j}{\partial x'^i} = \\ = \frac{\partial \phi}{\partial x^i} - \frac{\partial \phi}{\partial x^j}\omega^j_{\cdot i} + \omega^{kl}T_{kl}\frac{\partial \phi}{\partial x^i}, \tag{9.91}$$

în care ţinem cont de inversa transformării (9.4) scrisă infinitezimal, adică

$$x^i = x'^i - \omega^i_{\cdot j}\, x'^j, \tag{9.92}$$

ne conduce la legea de transformare a derivatelor câmpului ϕ:

$$\phi',_i = \phi,_i - \phi,_j\, \omega^j_{\cdot i} + \omega^{kl}T_{kl}\phi,_i, \tag{9.93}$$

sau

$$\delta\phi,_i = -\phi,_j\, \omega^j_{\cdot i} + \omega^{kl}T_{kl}\phi,_i. \tag{9.94}$$

Relaţiile (9.89) şi (9.93) pot fi explicitate pentru diferite tipuri de câmpuri. Astfel,

(i) pentru un **câmp scalar**, care se defineşte prin invarianţa

$$\phi'(x') = \phi(x) \tag{9.95}$$

la transformarea de coordonate (9.4), relaţia (9.89) ne conduce la soluţia

$$T_{ij} = 0 \tag{9.96}$$

pentru care legea de transformare a derivatelor devine

$$\phi',_i = \phi,_i - \phi,_j\, \omega^j_{\cdot i}. \tag{9.97}$$

(ii) Un **câmp vectorial** se transformă (tot) după (9.4) sau, utilizând exprimarea infinitezimală (9.14) a matricelor Lorentz, după

$$V'^k = V^k + \omega^k_{\cdot l}V^l. \tag{9.98}$$

Prin introducerea simbolului lui Kronecker δ, relaţia de mai sus devine

$$V'^k = V^k + \omega^{ij}\eta_{jl}\delta^k_i V^l = V^k + \frac{1}{2}\omega^{ij}\left(\eta_{lj}\delta^k_i - \eta_{li}\delta^k_j\right)V^l, \tag{9.99}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

punând în evidenţă operatorul

$$(T_{ij})^k_l = \eta_{lj}\delta^k_i - \eta_{li}\delta^k_j\,, \tag{9.100}$$

cu ajutorul căruia relaţia (9.93) capătă forma

$$V'^k{}_{,r} = V^k{}_{,r} - V^k{}_{,l}\,\omega^l_{\cdot r} + \omega^k_{\cdot s}V^s{}_{,r}\,. \tag{9.101}$$

(iii) Un **câmp tensorial** de ordinul al doilea se va transforma cu câte o matrice $A(\Lambda)$ pentru fiecare indice, adică

$$\phi'_{rs} = A^{\cdot p}_{r}A^{\cdot q}_{s}\phi_{pq}\,. \tag{9.102}$$

Utilizând exprimarea infinitezimală (9.14) a matricelor grupului Lorentz, vom obţine relaţia

$$\begin{aligned}\phi'_{rs} &= \phi_{rs} + \left(\omega^{\cdot p}_{r}\delta^q_s + \omega^{\cdot q}_{s}\delta^p_r\right)\phi_{pq} = \\ &= \phi_{rs} + \omega^{ij}\left(\eta_{ir}\delta^p_j\delta^q_s + \eta_{is}\delta^q_j\delta^p_r\right)\phi_{pq} = \\ &= \phi_{rs} + \frac{1}{2}\,\omega^{ij}\left(\eta_{ir}\delta^p_j\delta^q_s - \eta_{jr}\delta^p_i\delta^q_s + \eta_{is}\delta^q_j\delta^p_r - \eta_{js}\delta^q_i\delta^p_r\right)\phi_{pq}\,,\end{aligned} \tag{9.103}$$

unde în paranteză am pus în evidenţă operatorul

$$(T_{ij})^{pq}_{rs} = \eta_{ir}\delta^p_j\delta^q_s - \eta_{jr}\delta^p_i\delta^q_s + \eta_{is}\delta^q_j\delta^p_r - \eta_{js}\delta^q_i\delta^p_r\,. \tag{9.104}$$

Acesta ne va permite să scriem legea de transformare a derivatelor, (9.93), sub forma

$$\phi'_{rs,l} = \phi_{rs,l} - \phi_{rs,k}\omega^k_{\cdot l} + \omega^{\cdot p}_{r}\phi_{ps,l} + \omega^{\cdot q}_{s}\phi_{rq,l}\,. \tag{9.105}$$

(iv) Fie **câmpul spinorial**

$$\Psi(x) = \begin{pmatrix}\psi^1(x)\\ \psi^2(x)\\ \psi^3(x)\\ \psi^4(x)\end{pmatrix}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi conjugatul Dirac al acestuia

$$\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \beta\,, \text{ cu } \beta = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}\,, \quad \beta = -i\gamma^4\,, \tag{9.106}$$

unde cu 1 am notat matricea unitate (2×2), iar cu 0 matricea zero (2×2). Considerăm drept lege de transformare o relaţie matriceală generală, de forma

$$\delta\Psi = B\Psi\,, \tag{9.107}$$

astfel încât

$$\delta\bar{\Psi} = (B\Psi)^\dagger\beta = \bar{\Psi}\beta B^\dagger\beta = \bar{\Psi}\bar{B}\,, \tag{9.108}$$

unde am introdus notaţia

$$\bar{B} = \beta B^\dagger\beta \tag{9.109}$$

şi am utilizat proprietatea $\beta^2 = 1$. Pentru a găsi forma explicită a matricei infinitezimale B, deci a operatorilor $\{T_{ij}\}$, impunem ca $\Phi \equiv \bar{\Psi}\Psi$ să fie un scalar, iar $J_i \equiv \bar{\Psi}\gamma_i\Psi$, unde γ_i sunt matricele Dirac, să fie un cuadrivector. Astfel, cele două expresii se vor transforma după (9.95) şi respectiv (9.98), adică

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad \delta\Phi = \delta\left(\bar{\Psi}\Psi\right) = 0\,; \\ &\text{b)}\quad \delta J_i = \delta\left(\bar{\Psi}\gamma_i\Psi\right) = \omega_i^{\ j}\bar{\Psi}\gamma_j\Psi\,. \end{aligned} \tag{9.110}$$

Ţinând cont de (9.107) şi (9.108) în (9.110.a), rezultă

$$\bar{\Psi}\delta\Psi + \left(\delta\bar{\Psi}\right)\Psi = \bar{\Psi}B\Psi + \bar{\Psi}\bar{B}\Psi = 0\,,$$

adică, pentru Ψ şi $\bar{\Psi}$ arbitrar, matricea B trebuie să aibă proprietatea

$$\bar{B} = -B\,. \tag{9.111}$$

Utilizând (9.107) şi (9.108) în (9.110.b), obţinem

$$\bar{\Psi}\bar{B}\gamma_i\Psi + \bar{\Psi}\gamma_i B\Psi = \omega_i^{\ j}\bar{\Psi}\gamma_j\Psi\,,$$

adică, având în vedere relaţia (9.111), rezultă ecuaţia

$$\bar{\Psi}\left[\gamma_i\,,\, B\right]\Psi = \omega_i^{\ j}\bar{\Psi}\gamma_j\Psi\,,$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

care, pentru Ψ şi $\bar{\Psi}$ arbitrari, devine

$$[\gamma_i\,,\,B] = \omega_i^{\cdot j}\,\gamma_j \tag{9.112}$$

sau, prin înmulţire la stânga cu γ^i,

$$\gamma^i\gamma_i B - \gamma^i B\gamma_i = \omega^{ij}\gamma_i\gamma_j\,. \tag{9.113}$$

Să probăm acum că această ecuaţie este satisfăcută de următoarea alegere pentru B

$$B = \frac{1}{4}\,\omega^{ls}\gamma_l\gamma_s = \frac{1}{8}\,\omega^{ls}\,[\gamma_l\,,\,\gamma_s]\,. \tag{9.114}$$

Într-adevăr, înlocuind (9.114) în membrul stâng al lui (9.113), avem

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{4}\omega^{ls}\left[\gamma^i\gamma_i\gamma_l\gamma_s - \gamma^i\gamma_l\gamma_s\gamma_i\right] = \\
&= \frac{1}{4}\omega^{ls}\left[\gamma^i\gamma_i\gamma_l\gamma_s - 4\,\eta_{ls} + 4\,\gamma_l\gamma_s - \gamma^i\gamma_i\gamma_l\gamma_s\right] = \\
&= \frac{1}{4}\omega^{ls}\left[-4\,\eta_{ls} + 4\,\gamma_l\gamma_s\right] = \omega^{ls}\gamma_l\gamma_s\,,
\end{aligned}$$

unde am ţinut cont de proprietatea

$$\{\gamma_l\,,\,\gamma_s\} = 2\,\eta_{ls}\,1_{4\times 4}$$

şi de rezultatul nul al contracţiei tensorului antisimetric ω^{ls} cu tensorul simetric η_{ls}. Prin urmare, cu ajutorul matricelor γ_i, se pot construi şase matrice de spin,

$$S_{ij} = \frac{1}{4}\,[\gamma_i\,,\,\gamma_j]\,, \tag{9.115}$$

astfel încât matricea (9.114) să se poate exprima în raport cu acestea ca fiind

$$B = \frac{1}{2}\,\omega^{ij}S_{ij}\,. \tag{9.116}$$

Ţinând cont de forma explicită, (9.116), a matricei B, putem scrie relaţia de transformare (9.107) în forma concretă

$$\delta\Psi = \frac{1}{2}\,\omega^{ij}S_{ij}\,\Psi\,. \tag{9.117}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

De aici, se obţine relaţia de transformare a componentelor spinoriale

$$\psi'^r = \psi^r + \frac{1}{2}\omega^{ij}\,(S_{ij})^r_p\,\psi^p \tag{9.118}$$

şi, prin derivare, legea de transformare a derivatelor

$$\psi'^r{}_{,k} = \psi^r{}_{,k} - \psi^r{}_{,j}\;\omega^j_{\cdot k} + \frac{1}{2}\omega^{ij}\;(S_{ij})^r_p\;\psi^p{}_{,k}\;. \tag{9.119}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Capitolul 10

Elemente de teoria cuantică a câmpurilor

10.1 Interacţiuni electromagnetice

10.1.1 Regulile Feynman pentru particulele scalare

Amplitudinea de tranziţie

Pentru particulele de spin zero, descrise de ecuaţia Gordon (7.4), relaţia (7.16) pune în evidenţă două cazuri:

- Particulele *out*, adică $\vec{p}\cdot\vec{x} > 0$, corespunzând valorii *pozitive* a energiei, $E = +E_p$, sunt caracterizate de soluţia de undă plană (7.25),

$$\phi(\vec{x},t) = N\int d^3p\,\phi(\vec{p})\,e^{ipx}\;;\;\; px = \vec{p}\cdot\vec{x} - E_p t\,,$$

  unde factorul de normare, N, are expresia

$$N = \frac{1}{\sqrt{2V\,E_p}}\,, \tag{10.1}$$

  pentru care amplitudinea spectrală (7.30) satisface condiţia de normare (7.31).

- Cazul $E = -E_p$ corespunde unor particule *out* de energie *negativă*, pentru care introducem notaţia $\chi(\vec{p}) = \phi(-\vec{p})$, adică $\vec{p} \to -\vec{p}$, şi obţinem o

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

soluţie de forma

$$\phi(\vec{x},t) = N\int d^3p\,\chi(\vec{p})\,e^{-ipx}\;;\;\; px = \vec{p}\cdot\vec{x} - E_p t\,,$$

corespunzând unei particule *in* de energie *pozitivă*, care este *antiparticula*.

Pentru particulele de energie negativă, denumite de Gamow *particule măgar*, ecuaţia Gordon conduce la *probabilităţi negative*. Pentru a ieşi din această situaţie, Feynman a stabilit că *particulele de energie negativă, ce se propagă înapoi în timp (backward in time), sunt echivalente cu antiparticule de energie pozitivă, propagându-se înainte în timp* (*forward in time*) [18, 19]. Aceste concepte de înainte, respectiv înapoi în timp trebuie înţelese în modul următor: putem trece de la procese implicând particule "măgar" de 4-impuls $p = (\vec{p}, -E_p)$, la procese implicând numai antiparticule de 4-impuls $p = (-\vec{p}, E_p)$, schimbând semnul cuadriimpulsurilor primelor, deci inversând rolul stărilor *out* cu *in* şi energiile negative cu cele pozitive. Astfel, procesele de *emisie* (*absorbţie*) a unei *particule măgar* de cuadriimpuls p sunt echivalente, din punct de vedere fizic, cu *absorbţia* (*emisia*) unei *antiparticule* de cuadriimpuls $-p$ (după cum se observă şi în expresia obţinută pentru $\phi(\vec{x},t)$).

Afirmaţiile de mai sus sunt valabile nu numai pentru particulele de spin zero, ci şi pentru fermioni.

Acest capitol nefiind dedicat studiului câmpurilor cuantice libere, prezentat în Capitolul 7, ci particulelor aflate în câmp electromagnetic, în baza celor discutate în paragraful 9.2, putem păstra covarianţa teoriei prin înlocuirea derivatei uzuale, ∂_j, cu derivata $U(1)$-*gauge* covariantă (9.68), adică

$$\partial_j \;\to\; D_j = \partial_j + ieA_j\,.$$

Astfel, ecuaţia (7.4) capătă forma (7.12), adică

$$\left(D_j D^j - m^2\right)\phi = 0$$

sau

$$\left[(\partial_j + ieA_j)\left(\partial^j + ieA^j\right) - m^2\right]\phi =$$
$$= (\Box - m^2)\phi + ie\,A_j\,\partial^j\phi + ie\,\partial_j(A^j\phi) - e^2 A_j A^j\,\phi = 0\,,$$

în care, lucrând în ipoteza unor câmpuri electromagnetice slabe, putem neglija termenul conţinând $e^2 A_j A^j$. În consecinţă, obţinem ecuaţia:

$$(\Box - m^2)\phi = -ie\left(A_j\,\partial^j\phi + \partial_j(A^j\phi)\right) \qquad (10.2)$$

BCU IAŞI / CENTRALA UNIVERSITARĂ LIBRARY

sau

$$(\Box - m^2)\phi = -V\phi, \tag{10.3}$$

unde termenul *potenţial* din membrul drept,

$$V = ie\left(A_j\,\partial^j\phi + \partial_j(A^j\phi)\right), \tag{10.4}$$

poate fi identificat cu o *perturbaţie*. Astfel, fără a face apel la formalismul uzual al Teoriei Cuantice a Câmpurilor, bazat pe matricea S şi pe introducerea *produsului cronologic* [35, 37, 48], putem studia împrăştierea particulelor în câmpuri exterioare, utilizând relaţiile deduse în cadrul teoriei perturbaţiilor dependente de timp [1]. Revenind la Capitolul 4, să amintim că hamiltonianul

$$H = H_0 + V(x,t), \tag{10.5}$$

satisfăcând ecuaţia Schrödinger dependentă de timp, are ca stări posibile superpoziţia (4.103), adică

$$\phi(\vec{x},t) = \sum_n c_n(t)\, e^{-iE_nt}\, u_n(\vec{x}), \tag{10.6}$$

unde u_n sunt soluţiile ecuaţiei neperturbate (4.101), iar $c_n(t)$ sunt coeficienţi de amplitudine, variabili în timp, soluţii ale ecuaţiei (4.104). Limitându-ne la corecţiile de ordin I, vom utiliza formula *amplitudinii de tranziţie*, (4.113), adică relaţia

$$\mathcal{A}_{fi} = -i\int d^3x\,dt\,\phi_f^*(\vec{x},t)\,V(\vec{x},t)\,\phi_i(\vec{x},t) = \tag{10.7}$$

$$= -i\int d^3x\,dt\,u_f^*(\vec{x})\,e^{iE_ft}\,V(\vec{x},t)\,u_i(\vec{x})\,e^{-iE_it}, \tag{10.8}$$

pentru a exprima *tranziţia între starea iniţială*, descrisă prin

$$\phi_i(\vec{x},t) = u_i(\vec{x})\,e^{-iE_it} \tag{10.9}$$

sau

$$\phi_i(x) = N_i\,e^{ip_ix}\,,\quad p_i\,x = \vec{p}_i\cdot\vec{x} - E_i\,t, \tag{10.10}$$

şi *starea finală*, descrisă prin

$$\phi_f(\vec{x},t) = u_f(\vec{x})\,e^{-iE_ft} \tag{10.11}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

sau

$$\phi_f(x) = N_f\, e^{ip_f x}\ ,\ \ p_f\, x = \vec{p}_f \cdot \vec{x} - E_f\, t\,, \tag{10.12}$$

unde factorii de normare sunt de forma (10.1).

Relaţia (10.7) ne permite să calculăm amplitudinea de împrăştiere a unei particule scalare, de exemplu un mezon π^+, în câmpul electromagnetic exterior A^j. Astfel, înlocuind expresiile (10.10) şi (10.12) – pentru particula *in*, respectiv *out*, – şi potenţialul (10.4) în relaţia (10.7), obţinem:

$$\mathcal{A} = -\,i\,N_i N_f \int d^4x\, e^{-ip_f x}\, ie\left(A_j \partial^j + \partial_j A^j\right) e^{ip_i x}\,,$$

de unde, integrând prin părţi al doilea termen, rezultă [1]

$$\begin{aligned}\mathcal{A} &= eN_iN_f \int d^4x\, A^j \left[e^{-ip_f x}\, \partial_j e^{ip_i x} - \left(\partial_j e^{-ip_f x}\right) e^{ip_i x}\right] = \\ &= i\,e\,N_iN_f \left[p_i^j + p_f^j\right] \int d^4x\, A_j\, e^{i(p_i - p_f)x}\,.\end{aligned} \tag{10.13}$$

Pe de altă parte, observăm că relaţia (10.7), adică

$$\begin{aligned}\mathcal{A} &= -\,i \int d^4x\, \phi_f^*(x)\, V(x)\, \phi_i(x) = e \int d^4x\, \phi_f^* \left(A_k \partial^k + \partial_k A^k\right) \phi_i = \\ &= e \int d^4x\, A^k \left[\phi_f^*\, \partial_k \phi_i - \left(\partial_k \phi_f^*\right) \phi_i\right]\,,\end{aligned} \tag{10.14}$$

este de forma

$$\mathcal{A} = -\,i \int d^4x\, A^k j_k\,, \tag{10.15}$$

adică exprimă un lagrangeian de tipul $\int d^4x\, j_k A^k$, de interacţiune între *curentul de tranziţie*

$$j_k(x) = ie\left[\phi_f^*\left(\partial_k \phi_i\right) - \left(\partial_k \phi_f^*\right) \phi_i\right] \tag{10.16}$$

(vezi (7.17)) şi câmpul electromagnetic descris de potenţialul A^k.

Împrăştierea $\pi^+\ K^+$

În baza celor prezentate până acum, să analizăm un proces, de exemplu

$$\pi^+ + K^+ \to \pi^+ + K^+\,,$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

descris de *diagrama Feynman* din figura 10.1, **Anexa B**. Presupunem că mezonul π^+, exprimat prin curentul

$$j_i(\pi^+) \overset{(10.16)}{=} ie\left[\phi_3^*\left(\partial_i\phi_1\right) - \left(\partial_i\phi_3^*\right)\phi_1\right] = -eN_1N_3(p_1+p_3)_i\, e^{i(p_1-p_3)x}, \quad (10.17)$$

se împrăştie în câmpul A^i creat de K^+ şi exprimat, prin intermediul ecuaţiei Maxwell [1]

$$\Box A^i = j^i(K^+), \quad (10.18)$$

în funcţie de curentul

$$j^i(K^+) \overset{(10.16)}{=} ie\left[\phi_4^*\left(\partial^i\phi_2\right) - \left(\partial^i\phi_4^*\right)\phi_2\right] = -eN_2N_4(p_2+p_4)^i\, e^{i(p_2-p_4)x}. \quad (10.19)$$

Datorită faptului că, în relaţiile (10.17) şi (10.19), coordonata x apare doar pe lângă cuadrivectorul *transfer de impuls*,

$$q = p_4 - p_2 = p_3 - p_1, \quad (10.20)$$

rezultă, în baza relaţiei evidente

$$\Box e^{-iqx} = -q^2\, e^{-iqx}, \quad (10.21)$$

că ecuaţia (10.18) este verificată de un potenţial de forma

$$A^i(K^+) = -\frac{1}{q^2}\, j^i(K^+). \quad (10.22)$$

Înlocuim (10.17) şi (10.22) în relaţia (10.15) şi obţinem următoarea formă a amplitudinii de tranziţie:

$$\begin{aligned}
\mathcal{A} &= -i\int d^4x\, A^i(K^+)\, j_i(\pi^+) = \\
&= i\int d^4x\, j^i(K^+)\,\frac{\eta_{ik}}{q^2}\, j^k(K^+) = \\
&= ie^2N_1N_2N_3N_4\,(p_2+p_4)^i\,\frac{\eta_{ik}}{q^2}\,(p_1+p_3)^k\int d^4x\, e^{i(p_1+p_2-p_3-p_4)x},
\end{aligned}$$

adică

$$\mathcal{A} = \mathcal{N}(2\pi)^4\delta^4(p_3+p_4-p_1-p_2)\,(-ie)(p_2+p_4)^i\,\frac{-i\eta_{ik}}{q^2}\,(-ie)(p_1+p_3)^k, \quad (10.23)$$

unde punem în evidenţă următorii factori:

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

- $\mathcal{N}$, exprimând produsul factorilor de normare $N_i = \frac{1}{\sqrt{2VE_i}}$;
- $(2\pi)^4\delta^4(p_3 + p_4 - p_1 - p_2)$, exprimând conservarea cuadriimpulsului în procesul studiat;
- *vertexurile* $(-ie)(p_2 + p_4)^i$ şi $(-ie)(p_1 + p_3)^k$;
- *propagatorul* unui *foton virtual*, intermediar, ce mediază interacţiunea electromagnetică dintre mezonii π^+ şi K^+, având expresia [13]

$$i\Delta_{ik} = \frac{-i\eta_{ik}}{q^2}, \tag{10.24}$$

şi al cărui impuls, (10.20), nu satisfăce condiţia *on-shell*, deoarece $q^2 \neq 0$.

Cu aceste observaţii, putem descrie procesul studiat prin diagrama Feynman din figura 10.2. Practic, dată diagrama Feynman a unui proces, amplitudinea de împrăştiere, $\mathcal{A}_{fi}$, poate fi scrisă direct, ţinând cont de următoarele reguli, denumite *regulile Feynman*:

- există un factor de normare, N_i, pentru fiecare linie externă;
- se introduce funcţia $(2\pi)^4\delta(\sum p_f - \sum p_i)$, exprimând conservarea cuadriimpulsurilor;
- fiecărui vertex de tipul celui din figura 10.3 i se asociază *funcţia vertex* $-ie(p_1 + p_3)_i$, proporţională cu constanta de cuplaj a interacţiunii, în cazul nostru cu sarcina electronului e;
- pentru fiecare linie fotonică internă, exprimând un foton virtual de impuls q, *off-shell*, ce mediază interacţiunile electromagnetice dintre particulele încărcate cu sarcină electrică, vom avea un factor $i\Delta_{ik}(q)$, egal cu propagatorul fotonului, (10.24) (vezi figura 10.3).

10.1.2 Secţiunea de împrăştiere şi rata de dezintegrare

În acest paragraf, vom prezenta modul de calcul al unor mărimi ce caracterizează procesele de împrăştiere şi dezintegrare, care, putând fi măsurate experimental, ne permit să verificăm în ce măsură modelele teoretice pe care le utilizăm descriu, în mod corect, diferite procese fizice.

BUCHAREST CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Pentru început, să considerăm un proces de împrăştiere. În secţiunea precedentă, am presupus în starea iniţială, $|i\rangle$, doar două particule, deci $i = 1, 2$, ce se deplasează coliniar, de la $-\infty$, cu viteza relativă $v = |\vec{v}_1 - \vec{v}_2|$. În urma coliziunii, rezultă o stare finală, $|f\rangle$, cu N particule, $f = 1, 2, \ldots, N$, care se deplasează spre $+\infty$. Am caracterizat procesul de interacţiune printr-o *amplitudine de împrăştiere*, $\mathcal{A}_{fi}$, având, în general, forma

$$\mathcal{A}_{fi} = (2\pi)^4 \delta^4(\sum p_f - \sum p_i) \prod_i \frac{1}{\sqrt{2VE_i}} \prod_f \frac{1}{\sqrt{2VE_f}} \mathcal{M}, \tag{10.25}$$

unde $p_i = (\vec{p}_i, E_i)$ şi $p_f = (\vec{p}_f, E_f)$ sunt cuadriimpulsurile particulelor iniţiale, respectiv finale, iar $\mathcal{M}$ se numeşte *amplitudine Feynman* şi se calculează, pentru fiecare proces în parte, aplicând regulile Feynman. Pentru a introduce *probabilitatea de tranziţie în unitatea de timp*, adică (vezi (4.114))

$$w = \frac{|\mathcal{A}_{fi}|^2}{T}, \tag{10.26}$$

este necesar să trecem la valori finite pentru T şi V. În acest caz, expresia

$$\begin{aligned}
&(2\pi)^4 \delta^4 \left(\sum p_f - \sum p_i\right) = \\
&= \lim_{T\to\infty, V\to\infty} \int_{-T/2}^{T/2} dt \int_V d^3x \exp\left[ix\left(\sum p_f - \sum p_i\right)\right] \equiv \\
&\equiv \lim_{T\to\infty, V\to\infty} \delta_{TV}\left(\sum p_f - \sum p_i\right)
\end{aligned} \tag{10.27}$$

adică, pentru valori mari ale lui T şi V, expresia

$$\delta_{TV}\left(\sum p_f - \sum p_i\right) = (2\pi)^4 \delta^4 \left(\sum p_f - \sum p_i\right)$$

poate fi ridicată la pătrat şi obţinem [35]

$$\left[\delta_{TV}\left(\sum p_f - \sum p_i\right)\right]^2 = TV\,(2\pi)^4 \delta^4 \left(\sum p_f - \sum p_i\right), \tag{10.28}$$

cu erori care tind la zero, atunci când $T \to \infty$ şi $V \to \infty$. Astfel, relaţia (10.26) devine

$$w = V\,(2\pi)^4 \delta^4 \left(\sum p_f - \sum p_i\right) \frac{1}{2VE_1} \frac{1}{2VE_2} \left(\prod_f \frac{1}{2VE_f}\right) |\mathcal{M}|^2, \tag{10.29}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

exprimând rata de tranziţie pentru o singură stare finală, f.

Deoarece starea finală nu este unică, vom considera mai multe stări finale, caracterizate de valori ale vectorilor impuls cuprinse în intervale $(\vec{p}_f, \vec{p}_f + d\vec{p}_f)$, $f = 1, \ldots, N$ şi vom multiplica expresia lui w cu numărul stărilor finale în spaţiul fazelor, adică

$$dN_f = \prod_f \frac{V d\vec{p}_f}{N_0},$$

unde alegerea factorul de normare, N_0, se face pe diferite considerente. În cazul nostru, deoarece am renunţat la $\sqrt{(2\pi)^3}$ în expresia funcţiei de stare (10.1), vom lua

$$N_0 = (2\pi)^3, \tag{10.30}$$

adică

$$dN_f = \prod_f \frac{V d\vec{p}_f}{(2\pi)^3}. \tag{10.31}$$

Pentru a obţine o mărime ce poate fi comparată de la un experiment la altul, trebuie să eliminăm dependenţa probabilităţii de tranziţie de fluxul particulelor incidente şi de numărul particulelor ţintă pe unitatea de volum. Pentru aceasta, introducem o altă mărime ce caracterizează un proces de împrăştiere, şi anume *secţiunea diferenţială*, definită ca *rata de tranziţie spre un grup de stări finale, pentru un singur centru de împrăştiere în volumul* V, adică

$$d\sigma = \frac{w}{J_i} dN_f, \tag{10.32}$$

unde fluxul J_i, al particulelor incidente coliniare, poate fi exprimat în funcţie de viteza relativă a acestora ca fiind:

$$J_i = \frac{1}{V} |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| = \frac{v}{V}. \tag{10.33}$$

Ţinând cont de (10.29, 31, 33), expresia (10.32) a secţiunii diferenţiale devine:

$$d\sigma = (2\pi)^4 \delta^4 \left(\sum p_f - \sum p_i \right) \frac{1}{4E_1 E_2 v} \left(\prod_f \frac{d\vec{p}_f}{(2\pi)^3 2E_f} \right) |\mathcal{M}|^2. \tag{10.34}$$

Observăm că, în (10.34), nu mai apare volumul V, iar factorul de flux (10.33) din (10.32) conduce la o expresie Lorentz-covariantă, de forma

$$E_1 E_2 v = \sqrt{(p_1 \cdot p_2)^2 - m_1^2 m_2^2}, \tag{10.35}$$

BUJASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

pe care o vom justifica atât în sistemul laboratorului (SL), cât şi în sistemul centrului de masă (SCM).

Astfel, în (SL), putem alege un referenţial în care una dintre particule, de exemplu particula 1, este în repaus, jucând rol de ţintă. În acest caz, cuadri-impulsurile fiind $p_1 = (\vec{0},\, E_1 = m_1)$ şi $p_2 = (\vec{p}_2,\, E_2)$ şi ţinând cont de relaţiile

$$\begin{aligned} &\text{a)}\quad \vec{v} = \frac{\vec{p}}{E} \\ &\text{b)}\quad \vec{p}^{\,2} = E^2 - m^2\,, \end{aligned} \tag{10.36}$$

membrul drept din (10.35) devine egal cu membrul stâng, deoarece

$$\sqrt{(p_1 \cdot p_2)^2 - m_1^2 m_2^2} = \sqrt{(m_1 E_2)^2 - m_1^2 m_2^2} = m_1 \sqrt{E_2^2 - m_2^2} = \overset{(10.36.b)}{=} m_1 |\vec{p}_2| \overset{(10.36.a)}{=} m_1 E_2 |\vec{v}_2| = m_1 E_2 v = E_1 E_2 v\,.$$

În (SCM), unde $\vec{p}_1 + \vec{p}_2 = 0$, viteza relativă este

$$v = |\vec{v}_1 - \vec{v}_2| = \left| \frac{\vec{p}_1}{E_1} - \frac{\vec{p}_2}{E_2} \right| = |\vec{p}_1| \frac{E_1 + E_2}{E_1 E_2}\,, \tag{10.37}$$

iar

$$(p_1 \cdot p_2)^2 = (|\vec{p}_1|^2 + E_1 E_2)^2\,. \tag{10.38}$$

Ţinând cont de (10.37) şi (10.38) în relaţia (10.35) şi ridicând-o la pătrat, obţinem:

$$|\vec{p}_1|^2 (E_1 + E_2)^2 = (|\vec{p}_1|^2 + E_1 E_2)^2 - m_1^2 m_2^2\,,$$

care, în ipoteza $|\vec{p}_1|^2 = |\vec{p}_2|^2$, ne conduce la relaţia lui Einstein (10.36.b).

Să trecem acum la studiul *proceselor de dezintegrare*. Considerăm, în starea iniţială, o singură particulă, aflată în sistemul propriu, cu 4-impulsul $P = (\vec{0}, M)$, care se dezintegrează în n particule cu impulsurile $(p_j = (\vec{p}_j,\, E_j))_{j=\overline{1,n}}$. În acest caz, expresia (10.25) devine

$$\mathcal{A} = (2\pi)^4\, \delta^4 \left(\sum_{j=1}^{n} p_j - P \right) \frac{1}{\sqrt{2VM}} \prod_{j=1}^{n} \frac{1}{\sqrt{2VE_j}}\, \mathcal{M}\,. \tag{10.39}$$

Prin înlocuire în (10.26) şi luarea în considerare a elementului (10.31) din spaţiul fazelor, obţinem aşa-numita *rată parţială de dezintegrare*, adică

$$d\Gamma = \frac{(2\pi)^4}{2M}\, \delta^4 \left(\sum_{j=1}^{n} p_j - P \right) \prod_{j=1}^{n} \frac{d\vec{p}_j}{(2\pi)^3 2E_j}\, |\mathcal{M}|^2\,. \tag{10.40}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Pentru a avea o mărime fizică măsurabilă experimental, trebuie să sumăm după toate cele n stări finale. Astfel, prin efectuarea integralei în spaţiul stărilor finale, obţinem *rata de dezintegrare*

$$\Gamma = \int d\Gamma . \tag{10.41}$$

Practic, se constată că o particulă se poate dezintegra după mai multe canale, fiecare fiind caracterizat printr-o rată de dezintegrare de tipul (10.41). De exemplu, pentru mezonul B, s-au pus în evidenţă experimental mai multe canale, printre care:

$$\begin{aligned} B &\rightarrow D\pi ; \\ B &\rightarrow K\pi ; \\ B &\rightarrow D\rho ; \\ B &\rightarrow De\nu \ etc. \end{aligned}$$

Prin sumarea ratelor corespunzătoare tuturor canalelor de dezintegrare a unei particule, se obţine *rata totală de dezintegrare*, adică

$$\Gamma_{total} = \sum \Gamma , \tag{10.42}$$

al cărei invers,

$$\tau = \frac{1}{\Gamma_{total}} , \tag{10.43}$$

poartă numele de *timp de viaţă*. Acesta este caracteristic fiecărei particule şi poate fi măsurat experimental. De asemenea, pentru fiecare canal în parte, măsurătorilor efectuate asupra mărimii

$$BR = \frac{\Gamma}{\Gamma_{total}} = \tau\Gamma , \tag{10.44}$$

numită *branching ratio*, sunt puse în corespondenţă cu estimările teoretice, oferindu-ne o imagine asupra corectitudinii şi limitelor modelelor prin care descriem diferitele procese de dezintegrare.

ECU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

10.1.3 Regulile Feynman pentru fermioni

Pentru studiul particulelor de spin 1/2, considerăm ecuaţia Dirac (8.93) ale cărei soluţii, (8.167), sunt (ţinând cont de (8.134)):

$$\psi_+^A(x) = \frac{1}{\sqrt{2VE_p}}\, u^A(p,s)\, e^{ipx}\,, \tag{10.45}$$

pentru frecvenţele pozitive şi

$$\psi_-^A(x) = \frac{1}{\sqrt{2VE_p}}\, v^A(p,s)\, e^{-ipx}\,, \tag{10.46}$$

pentru frecvenţele negative.[1] Sistemul fundamental de bispinori $u^A(p,s)$ şi $v^A(p,s)$, unde s desemnează starea de spin, este dat de relaţia (8.160), cu

$$\mathcal{N} = \sqrt{E_p + m} = \sqrt{E}\,.$$

Indicele A provine de la ξ^A, unde

$$\xi^1 = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}\,;\ \xi^2 = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}\,,$$

şi ia valoarea 1 pentru *particula* de *spin up* sau *antiparticula* de *spin down*, şi valoarea 2, pentru *particula* de *spin down* sau *antiparticula* de *spin up*.

Dintre proprietăţile bispinorilor, demonstrate în Capitolul 8 şi care ne vor fi utile în cele ce urmează, amintim relaţiile de *ortogonalitate* (8.162), adică

$$\begin{aligned} u^{\dagger A}(p)\, u^B(p) &= 2\,E_p\,\delta^{AB} \\ v^{\dagger A}(p)\, v^B(p) &= 2\,E_p\,\delta^{AB} \end{aligned} \tag{10.47}$$

şi *relaţiile de dualitate* (8.178), adică

$$\bar{u}^A(p)\, u^B(p) = -\,\bar{v}^A(p)\, v^B(p) = 2m\,\delta^{AB}\,. \tag{10.48}$$

De asemenea, pentru calculul secţiunilor de împrăştiere, va fi necesar să sumăm după stările de spin, atât în starea iniţială, cât şi în starea finală. Relaţiile

[1] În (8.134) s-a considerat că volumul V este egal cu unu. În ceea ce priveşte factorul $(2\pi)^3$, prezent în expresiile care dau $f_{\vec{p}}$ şi $\bar{f}_{\vec{p}}$, îl vom omite pentru moment, ca şi în cazul câmpului scalar, dar îl vom introduce în factorul de normare al numărului stărilor finale din spaţiul fazelor, (10.30).

(8.185) ne permit să exprimăm aceaste sume sub forma următoarelor matrice 4×4:

$$\sum_s u(p,s)\,\bar{u}(p,s) = u(p,\uparrow)\,\bar{u}(p,\uparrow) + u(p,\downarrow)\,\bar{u}(p,\downarrow) =$$

$$= \begin{pmatrix} E_p + m & -\vec{p}\cdot\vec{\sigma} \\ \vec{p}\cdot\vec{\sigma} & -(E_p - m) \end{pmatrix} = -i\,(\hat{p} + im) \qquad (10.49)$$

şi, respectiv,

$$\sum_s v(p,s)\,\bar{v}(p,s) = -i\,(\hat{p} - im)\,, \qquad (10.50)$$

unde $\hat{p} = \gamma^i p_i$.

Pentru a deduce regulile Feynman pentru fermioni, vom analiza împrăştierea

$$e^-(p_1,s_1) + \pi^+(p_2) \to e^-(p_3,s_3) + \pi^+(p_4)\,.$$

Procedând în mod analog ca în cazul împrăştierii mezonilor π şi K, vom considera că electronul, descris de curentul

$$j_k(e) = -e\,\bar{\psi}_3\,\gamma_k\,\psi_1 =$$

$$\overset{(10.45)}{=} -e\,\frac{1}{\sqrt{2VE_3}}\,\frac{1}{\sqrt{2VE_1}}\,\bar{u}(p_3,s_3)e^{-ip_3x}\,\gamma_k\,u(p_1,s_1)e^{ip_1x}\,, \qquad (10.51)$$

se împrăştie în câmpul creat de mezonul π, adică

$$A^k(\pi^+) \overset{(10.22)}{=} -\frac{1}{q^2}\,j^k(\pi^+) =$$

$$\overset{(10.17)}{=} \frac{1}{q^2}\,e\,\frac{1}{\sqrt{2VE_2}}\,\frac{1}{\sqrt{2VE_4}}\,(p_2+p_4)^k\,e^{i(p_2-p_4)x}\,. \qquad (10.52)$$

Amplitudinea de împrăştiere, (10.15) în care înlocuim relaţiile (10.51) şi (10.52), capătă forma

$$\mathcal{A} = \frac{1}{\sqrt{2VE_1}}\,\frac{1}{\sqrt{2VE_2}}\,\frac{1}{\sqrt{2VE_3}}\,\frac{1}{\sqrt{2VE_4}}\,(2\pi)^4\delta^4(p_3+p_4-p_1-p_2)\times$$

$$\times(-ie)(p_2+p_4)^k\,\frac{-i\,\eta_{ki}}{q^2}\,\underbrace{(-ie)\,\bar{u}(p_3,s_3)\gamma^i u(p_1,s_1)}\,, \qquad (10.53)$$

fiind asociată diagramei Feynman din figura 10.4.

În (10.53), factorul subliniat pune în evidenţă următoarele *reguli Feynman specifice fermionilor*:

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

- factorul de vertex este $-ie\gamma^i$;
- *electronul*, de impuls p şi spin s, care *iese* din vertex, se reprezintă prin $\bar{u}(p,s)$;
- *electronul*, de impuls p şi spin s, care *intră* în vertex, se reprezintă prin $u(p,s)$;

La acestea se mai adaugă următoarele două reguli Feynman, care rezultă imediat dacă, în locul electronului, am fi considerat antiparticula acestuia, adică pozitronul:

- *pozitronul*, de impuls p şi spin s, care *intră* în vertex, se reprezintă prin $\bar{v}(p,s)$;
- *pozitronul*, de impuls p şi spin s, care *iese* din vertex, se reprezintă prin $v(p,s)$.

Observaţie importantă

Deoarece fiecare fermion este caracterizat atât de cuadriimpuls, cât şi de o stare de spin, la calculul ratei parţiale, sau totale, de dezintegrare se va face *medierea după spini în starea iniţială* şi *sumarea după spini în starea finală*. Pentru aceasta, se vor utiliza relaţiile (10.49) şi (10.50).

10.2 Fermionii în Modelul Weinberg–Salam

Prima teorie de unificare, a forţelor electrice şi magnetice, datează de peste 100 de ani şi aparţine lui J.C. Maxwell, constituind bazele actualei *Electrodinamici clasice şi cuantice*. În ceea ce priveşte interacţiunea slabă, care îşi datorează numele intensităţii sale, aceasta şi-a găsit o descriere satisfăcătoare, la energii joase, prin utilizarea lagrangeianului Fermi (1934)

$$\mathcal{L} = -\frac{G_F}{\sqrt{2}} J_i^\dagger J^i + c.h., \tag{10.54}$$

unde

$$G_F = 1,16637(2) \times 10^{-5}\ \mathrm{GeV}^{-2}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

este *constanta Fermi de cuplaj*, iar curenţii fermionici, încărcaţi, conţin o parte leptonică şi una hadronică, adică

$$J_i = J_{il} + J_{ih}\,, \tag{10.55}$$

cu

$$\begin{aligned} J_{il} &= \bar{\nu}_e \gamma_i e + \bar{\nu}_\mu \gamma_i \mu\,, \\ J_{ih} &= \bar{p}\gamma_i n\,. \end{aligned} \tag{10.56}$$

Din păcate, o astfel de teorie nu este renormabilă, adică divergenţele sale nu pot fi absorbite prin redefinirea constantelor de cuplaj [7].

O altă posibilitate era aceea a construirii unei teorii analoage Electrodinamicii, adică bazată pe un lagrangeian de tipul

$$\mathcal{L}_W = g_W \left(J_i W^i + c.h. \right), \tag{10.57}$$

unde constanta g_W (W provine de la *weak*, adică slabă) cuplează curenţii încărcaţi la bozonii vectoriali $W^\pm$. Cum raza de acţiune a interacţiunii slabe este mică,

$$r_W = 2 \cdot 10^{-16}\,\mathrm{cm}\,,$$

rezultă că masa acestor câmpuri vectoriale este mare,

$$m_W = \frac{\hbar}{r_W c} \approx 81\ \mathrm{GeV}\,,$$

iar lagrangeianul care le descrie conţine, pe lângă partea cinetică (9.76), şi un termen de masă, $m_W^2 W_i^\dagger W^i$, care nu numai că nu este gauge-covariant, dar strică şi renormabilitatea teoriei.

După publicarea, în 1954, a lucrării lui Yang şi Mills [49], Schwinger avansează ideea construirii unei teorii *gauge* unice, care să unifice interacţiunea electromagnetică cu interacţiunea slabă. Aceasta trebuia să fie o teorie chirală deoarece, în 1956, se semnalase violarea parităţii în interacţiunile nucleare slabe în care este prezentă particula neutrino şi să ţină cont de diferenţa enormă dintre masele celor două tipuri de câmpuri vectoriale care mediază aceste interacţiuni.

În 1967, Steven Weinberg, şi în 1968, Abdus Salam, elaborează *teoria interacţiunilor electroslabe* care s-a impus, datorită multiplelor confirmări experimentale, ca una dintre cele mai valoroase teorii ale secolului nostru, autorilor

BUCUREŞTI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

săi fiindu-le decernat Premiul Nobel, în 1979. În modelul interacţiunilor electroslabe, sau *modelul Weinberg-Salam*, bozonii intermediari ce mediază interacţiunile slabe sunt iniţial de masă nulă, devenind masivi prin aşa-numitul *mecanism Higgs*, ca urmare a ruperii spontane a simetriei interne $SU(2)$, şi astfel, după cum avea să demonstreze 't Hooft în 1971, nu se strică renormabilitatea teoriei. În ceea ce priveşte alegerea grupului Lie, aceasta s-a făcut în felul următor: deoarece pentru curenţi, cel electromagnetic care se cuplează la fotonul A_i şi cei doi curenţi încărcaţi care se cuplează la $W_i^{\pm}$, sarcinile asociate nu închid o algebră Lie cu trei generatori, adică algebra $\mathcal{SU}(2)$, s-a extins grupul $SU(2)$ la cea mai simplă combinaţie, adică la produsul direct $SU(2)\times U(1)$. Din teoria grupurilor Lie, se cunoaşte că o astfel de combinaţie are patru generatori, deci patru câmpuri *gauge*, adică trei câmpuri pentru grupul $SU(2)$, notate cu A_i^{α} şi unul pentru grupul $U(1)$, notat cu B_i. Nu insistăm asupra descrierii mecanismului Higgs ci precizăm doar că bozonii $\{W_i^{\pm}, Z_i^0, A_i\}$, corespunzători câmpurilor fizice puse în evidenţă experimental, ce mediază interacţiunile slabe şi electomagnetice, vor fi obţinuţi din $\{A_i^1, A_i^2, A_i^3, B_i\}$ printr-o rotaţie de unghi Weinberg, θ_W. Trei dintre aceste câmpuri, anume $\{W_i^{\pm}\}$ şi Z_i^0 (corespunzătoare interacţiunii slabe), vor căpăta masă prin *mecanism Higgs*, iar al patrulea, fotonul, fiind asociat unei *simetrii reziduale* $U(1)$, va rămâne de masă nulă [7, 12, 13, 37, 51].

Odată stabilit grupul intern de simetrie, densitatea de lagrangeian (9.75) devine, pentru câmpuri fermionice nemasive,

$$\mathcal{L} = \bar{\Psi}\gamma^i D_i \Psi\,, \tag{10.58}$$

unde derivata covariantă (9.69) capătă forma explicită

$$D_i\Psi = \left(\partial_i - ig\frac{\sigma_\alpha}{2}A_i^\alpha - ig'\frac{Y}{2}B_i\right)\Psi\,. \tag{10.59}$$

Aceasta conţine: trei câmpuri *gauge*, $\{A_i^\alpha\}_{\alpha=\overline{1,3}}$, asociate generatorilor $T^\alpha = \frac{\sigma^\alpha}{2}$ ai grupului $SU(2)$, un câmp, B_i, asociat generatorului $\frac{Y}{2}$ al grupului $U(1)$ şi două constante de cuplaj, g şi g', corespunzătoare celor două grupuri interne. În ceea ce priveşte conţinutul de particule, menţionăm că dubletul fermionic Ψ poate fi de tipul

$$\Psi = \begin{pmatrix} \nu \\ l \end{pmatrix}, \tag{10.60}$$

BIBLIOTECA CENTRALĂ UNIVERSITARĂ

unde l este funcţia de undă a unui lepton, iar ν este funcţia de undă a particulei neutrino corespunzătoare acestuia, adică Ψ desemnează una dintre cele trei familii leptonice cunoscute:

$$\begin{pmatrix} \nu_e \\ e \end{pmatrix} ; \begin{pmatrix} \nu_\mu \\ \mu \end{pmatrix} ; \begin{pmatrix} \nu_\tau \\ \tau \end{pmatrix} . \tag{10.61}$$

Pentru sectorul hadronic, Ψ reprezintă unul dintre cei trei dubleţi corespunzători quark-urilor, adică

$$\begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} ; \begin{pmatrix} c \\ s \end{pmatrix} ; \begin{pmatrix} t \\ b \end{pmatrix} . \tag{10.62}$$

Teoria fiind aceeaşi pentru oricare dintre cele trei familii de leptoni sau de quark-uri, vom lucra, în cele ce urmează, cu o familie leptonică de tipul (10.60) şi cu familia de quark-uri

$$\Psi = \begin{pmatrix} q_{up} \\ q_{down} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} . \tag{10.63}$$

Deoarece s-a constatat experimental că neutrino este de chiralitate stângă, adică este descris de un spinor Weyl *left-handed*, se impune descompunerea fiecărui dublet Ψ după elicitate. Aşa cum am arătat în paragraful 9.2.1, aceasta se realizează prin utilizarea operatorilor de proiecţie (9.50), în care matricea γ^5 are forma bloc-diagonală (9.49), corespunzătoare reprezentării Weyl (9.48). Astfel, fiecare bispinor Ψ se va descompune într-o componentă *left* şi una *right*:

$$\Psi = \Psi_L + \Psi_R , \tag{10.64}$$

unde

$$\begin{aligned} \Psi_L &= P_L \Psi = \frac{1}{2}(1-\gamma_5)\Psi \\ \Psi_R &= P_R \Psi = \frac{1}{2}(1+\gamma_5)\Psi , \end{aligned} \tag{10.65}$$

iar termenul $\bar{\Psi}\gamma_i\Psi$ din lagrangeianul (10.58) devine

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}\gamma_i\Psi &= (\bar{\Psi}_L + \bar{\Psi}_R)\gamma_i(\Psi_L + \Psi_R) = \\ &= \bar{\Psi}_L\gamma_i\Psi_L + \bar{\Psi}_R\gamma_i\Psi_R = \\ &= \bar{\Psi}\gamma_i\frac{1-\gamma_5}{2}\Psi + \bar{\Psi}\gamma_i\frac{1+\gamma_5}{2}\Psi . \end{aligned} \tag{10.66}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

În continuare, vom utiliza notaţia ψ pentru dubleţi, înţelegând prin aceasta $\begin{pmatrix} \nu \\ l \end{pmatrix}_L$ sau $\begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix}_L$, şi notaţia ϕ pentru singleţii l_R, u_R, d_R. Generatorul grupului $U(1)$ este proporţional cu hipersarcina particulelor, calculată cu ajutorul relaţiei bine cunoscute

$$Y = 2(Q - T_3),$$

unde Q este sarcina electrică, iar T_3 este componenta a treia a izospinului, şi are valorile numerice:

- pentru dubletul leptonic

$$Y_l(\psi) = -1, \tag{10.67}$$

- pentru dubletul quark-urilor

$$Y_q(\psi) = \frac{1}{3}, \tag{10.68}$$

- pentru singleţii l_R, u_R, d_R:

$$\begin{aligned} &\text{a)} \quad Y(l) = -2 \\ &\text{b)} \quad Y(u) = \frac{4}{3} \\ &\text{c)} \quad Y(d) = -\frac{2}{3}. \end{aligned} \tag{10.69}$$

În lagrangeianul (10.58), punem în evidenţă partea de interacţiune pe care o descompunem în componentele *left* şi *right*, adică

$$\mathcal{L}_{int} = \bar{\Psi}\gamma^i \left[-ig\frac{\vec{\sigma}}{2} \cdot \vec{A}_i - ig'\frac{Y}{2}B_i \right] \Psi = \mathcal{L}_L + \mathcal{L}_R, \tag{10.70}$$

unde

$$\mathcal{L}_L = \bar{\psi}\gamma^i \frac{1-\gamma_5}{2} \left(-ig\frac{\vec{\sigma}}{2} \cdot \vec{A}_i - ig'\frac{Y}{2}B_i \right) \psi \tag{10.71}$$

$$\mathcal{L}_R = \bar{\phi}\gamma^i \frac{1+\gamma_5}{2} \left(-ig'\frac{Y}{2}B_i \right) \phi. \tag{10.72}$$

BCU IAŞI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Efectuăm o *rotaţie Weinberg*, de unghi

$$\operatorname{tg}\theta_W = \frac{g'}{g}\,, \tag{10.73}$$

şi redefinim câmpurile de etalonare, prin introducerea câmpurilor fizice

$$\begin{aligned} W_i^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(A_i^1 - iA_i^2\right) \\ W_i^- &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(A_i^1 + iA_i^2\right) \\ Z_i &= A_i^3\cos\theta_W - B_i\sin\theta_W \\ A_i &= A_i^3\sin\theta_W + B_i\cos\theta_W\,. \end{aligned} \tag{10.74}$$

Înlocuind

$$\begin{aligned} A_i^1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(W_i^+ + W_i^-\right) \\ A_i^2 &= \frac{i}{\sqrt{2}}\left(W_i^+ - W_i^-\right) \\ A_i^3 &= Z_i\cos\theta_W + A_i\sin\theta_W \\ B_i &= -Z_i\sin\theta_W + A_i\cos\theta_W \end{aligned} \tag{10.75}$$

şi

$$\begin{aligned} g_W &\equiv \frac{g}{2\sqrt{2}}\,, \\ g'\cos\theta_W &= g\sin\theta_W = |e|\,, \end{aligned} \tag{10.76}$$

unde e este sarcina electronului [7], în relaţiile (10.71, 72), obţinem

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_L \;=\; & -ig_W\,\bar\psi\,\gamma^i\,(1-\gamma_5)\,\sigma_+\,\psi\,W_i^+ - ig_W\,\bar\psi\,\gamma^i\,(1-\gamma_5)\,\sigma_-\,\psi\,W_i^- - \\ & - i\,\frac{|e|}{2}\,\bar\psi\,\gamma^i\,(1-\gamma_5)\left[\frac{\sigma^3}{2}+\frac{Y}{2}\right]A_i\,\psi - \\ & - \frac{ig}{4\cos\theta_W}\,\bar\psi\,\gamma^i\,(1-\gamma_5)\left[\sigma^3\cos^2\theta_W - \frac{g'}{g}\,Y\sin\theta_W\,\cos\theta_W\right]\psi\,Z_i = \\ \equiv\; & T_1 + T_2 + T_3 + T_4\,, \end{aligned} \tag{10.77}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

respectiv

$$\begin{aligned}\mathcal{L}_R &= \frac{ig'\sin\theta_W}{4} Y\,\bar{\phi}\gamma^i(1+\gamma_5)\phi\, Z_i - \\ &\quad - \frac{i\,|e|}{4} Y\,\bar{\phi}\gamma^i(1+\gamma_5)\phi\, A_i = \\ &\equiv T_5 + T_6\,. \end{aligned} \tag{10.78}$$

După cum vom vedea, matricele

$$\begin{aligned}\sigma_+ &= \frac{1}{2}(\sigma_1 + i\sigma_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \sigma_- &= \frac{1}{2}(\sigma_1 - i\sigma_2)\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}\end{aligned} \tag{10.79}$$

realizează saltul de sarcină în cadrul curenţilor fermionici încărcaţi, care se cuplează la $W_i^{\pm}$, trecând de la un spinor al dubleţilor (10.60) şi (10.63), la celălalt.

În cele ce urmează, vom explicita termenii notaţi cu $T_1 \ldots T_6$, pentru sectorul leptonic şi sectorul quark-urilor, şi vom prezenta diagramele Feynman şi vertexurile corespunzătoare.

10.2.1 Sectorul leptonic

În lagrangeianul (10.70), constituit ca suma termenilor $T_1 \ldots T_6$, vom grupa termenii de cuplaj al curenţilor fermionici la câmpurile vectoriale (10.74). Astfel, rezultă lagrangeieni de tipul gJ_iA^i, care se utilizează în calculul unor procese de împrăştiere sau de dezintegrare a particulelor aflate în interacţiune electromagnetică sau slabă, obţinându-se mărimi, a căror valoare numerică poate fi comparată cu măsurători experimentale. Înlocuind, în (10.77, 78), expresiile concrete ale dubletului şi singletului leptonic şi valorile (10.67), respectiv (10.69.a), ale hipersarcinilor corespunzătoare, obţinem:

- un termen exprimând cuplajul unui curent slab-leptonic încărcat la bozonul vectorial W_i^+, adică

$$\begin{aligned}T_1 &= -ig_W \begin{pmatrix} \bar{\nu} & \bar{l} \end{pmatrix}\gamma^i(1-\gamma_5)\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \nu \\ l \end{pmatrix} W_i^+ = \\ &= -ig_W\,\bar{\nu}\gamma^i(1-\gamma_5)l\,W_i^+\,,\end{aligned} \tag{10.80}$$

BCU CLUJ / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

- şi conjugatul său hermitic, adică

$$T_2 = -ig_W \bar{l}\gamma^i(1-\gamma_5)\nu W_i^- . \tag{10.81}$$

Acestora le corespund diagramele Feynman 10.5, trasate prin aplicarea regulilor Feynman pentru fermioni.

- Termenul uzual din Electrodinamica Cuantică,

$$\begin{aligned} T_3+T_6 &= -\frac{i|e|}{2}\begin{pmatrix}\bar{\nu} & \bar{l}\end{pmatrix}\gamma^i(1-\gamma_5)\begin{pmatrix}0 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\nu\\ l\end{pmatrix}A_i - \\ &\quad -\frac{i|e|}{4}(-2)\bar{l}\gamma^i(1+\gamma^5)l\,A_i = \\ &= -ie\bar{l}\gamma^i l\,A_i , \end{aligned} \tag{10.82}$$

pe care l-am utilizat în paragraful precedent la studiul interacţiunilor electromagnetice dintre leptoni, are acelaşi tip de diagramă Feynman.

- În sfârşit, termenilor de cuplaj al unor *curenţi slab-leptonici neutri*, puşi în evidenţă experimental în 1973, la CERN, la bozonul vectorial masiv Z_i^0, şi care sunt de forma

$$\begin{aligned} T_4+T_5 &= \frac{-ig}{4\cos\theta_W}\begin{pmatrix}\bar{\nu} & \bar{l}\end{pmatrix}\gamma^i(1-\gamma_5)\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -\cos(2\theta_W)\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\nu\\ l\end{pmatrix}Z_i + \\ &\quad +\frac{ig'\sin\theta_W}{4}(-2)\bar{l}\gamma^i(1+\gamma^5)l\,Z_i = \\ &= -\frac{ig}{4\cos\theta_W}\bar{\nu}\gamma^i(1-\gamma_5)\nu\,Z_i - \\ &\quad -\frac{ig}{4\cos\theta_W}\bar{l}\gamma^i(4\sin^2\theta_W - 1 + \gamma_5)l\,Z_i , \end{aligned} \tag{10.83}$$

le corespund diagramele Feyman din figura 10.6. În figura 10.6, am utilizat notaţia

$$g_Z \equiv \frac{g}{4\cos\theta_W} .$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

10.2.2 Sectorul quark-urilor

Utilizând dubletul (10.63), singleţii u_R, d_R şi valorile (10.68), (10.69.b), (10.69.c) ale hipersarcinilor corespunzătoare, expresiile generale (10.77) şi (10.78) ne vor conduce, după un calcul analog celui descris la sectorul leptonic, la următorii termeni, specifici interacţiunilor electroslabe ale quark-urilor:

- pentru cuplajul curenţilor quark-onici slabi la bozonii intermediari masivi $W^{\pm}$, obţinem analogul relaţiilor (10.80, 81), adică

$$T_1 = -i\, g_W\, \bar{u}\, \gamma^i (1-\gamma_5) d\, W_i^+ \tag{10.84}$$

şi

$$T_2 = -i\, g_W\, \bar{d}\, \gamma^i (1-\gamma_5) u\, W_i^- ,$$

cu diagramele Feynman din figura 10.7.

- Termenii exprimând cuplajul curenţilor slab neutri la bozonul vectorial masiv Z_i^0 rezultă ca fiind:

$$\begin{aligned} T_4 + T_5 \;=\; & \frac{-ig}{4\cos\theta_W} \begin{pmatrix} \bar{u} & \bar{d} \end{pmatrix} \gamma^i (1-\gamma_5) \times \\ & \times \begin{pmatrix} 1-\frac{4}{3}\sin^2\theta_W & 0 \\ 0 & -1+\frac{2}{3}\sin^2\theta_W \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} Z_i + \\ & + \frac{ig'\sin\theta_W}{4} \left(\frac{4}{3}\right) \bar{u}\, \gamma^i (1+\gamma_5) u\, Z_i + \\ & + \frac{ig'\sin\theta_W}{4} \left(\frac{-2}{3}\right) \bar{d}\, \gamma^i (1+\gamma_5) d\, Z_i = \\ = \; & -\frac{ig}{4\cos\theta_W}\, \bar{u}\, \gamma^i \left(1-\frac{8}{3}\sin^2\theta_W - \gamma_5\right) u\, Z_i - \\ & -\frac{ig}{4\cos\theta_W}\, \bar{d}\, \gamma^i \left(-1+\frac{4}{3}\sin^2\theta_W\, \gamma_5 + \gamma_5\right) d\, Z_i . \end{aligned} \tag{10.85}$$

- Cuplajul curentului electromagnetic la fotonul A_i este de aceeaşi formă

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

cu (10.82), fiind dat de următoarea combinaţie:

$$\begin{aligned} T_3 + T_6 \;=\; & -\frac{i|e|}{2}\begin{pmatrix} \bar{u} & \bar{d} \end{pmatrix}\gamma^i(1-\gamma_5)\begin{pmatrix} \frac{2}{3} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{3} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} u \\ d \end{pmatrix} A_i - \\ & -\frac{i|e|}{4}\left(\frac{4}{3}\right)\bar{u}\gamma^i(1+\gamma_5)u\,A_i - \\ & -\frac{i|e|}{4}\left(-\frac{2}{3}\right)\bar{d}\gamma^i(1+\gamma_5)d\,A_i = \\ =\; & -i\left(\frac{2}{3}|e|\right)\bar{u}\,\gamma^i\,u\,A_i \;-\; i\left(-\frac{1}{3}|e|\right)\bar{d}\gamma^i d\,A_i\,, \end{aligned} \tag{10.86}$$

unde am pus în paranteze sarcinile fracţionare ale quark-urilor de tip *up* şi *down*, adică $\frac{2}{3}|e|$ şi $-\frac{1}{3}|e|$.

Expresia (10.85), corespunzătoare lagrangeienilor ce exprimă cuplajul curenţilor quark-onici neutri slabi, la bozonul vectorial masiv neutru Z_i^0, poate fi adusă la forma simplă, uşor de memorat,

$$\begin{aligned} T_4 + T_5 \;=\; & -\frac{ig}{4\cos\theta_W}\,\bar{u}\,\gamma^i(1-\gamma_5)u\,g_L^u\,Z_i - \\ & -\frac{ig}{4\cos\theta_W}\,\bar{d}\,\gamma^i(1-\gamma_5)d\,g_L^d\,Z_i - \\ & -\frac{ig}{4\cos\theta_W}\,\bar{u}\,\gamma^i(1+\gamma_5)u\,g_R^u\,Z_i - \\ & -\frac{ig}{4\cos\theta_W}\,\bar{d}\,\gamma^i(1+\gamma_5)d\,g_R^d\,Z_i\,, \end{aligned} \tag{10.87}$$

prin introducerea mărimilor

$$g_{L,R}^{fermion} = 2(T_3 - Q\sin^2\theta_W)\,, \tag{10.88}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

ce caracterizează fiecare tip de fermion în parte. Astfel, pentru sectorul de quark, înlocuind

$$\begin{aligned} g_L^u &= 1 - \frac{4}{3}\sin^2\theta_W \\ g_R^u &= -\frac{4}{3}\sin^2\theta_W \\ g_L^d &= -1 + \frac{2}{3}\sin^2\theta_W \\ g_R^d &= \frac{2}{3}\sin^2\theta_W \end{aligned} \tag{10.89}$$

în (10.87), vom obţine relaţia (10.85), iar pentru sectorul leptonic, valorile

$$\begin{aligned} g_L^\nu &= 1 \\ g_R^\nu &= 0 \\ g_L^l &= -1 + 2\sin^2\theta_W \\ g_R^l &= 2\sin^2\theta_W \end{aligned} \tag{10.90}$$

ne vor conduce la expresia (10.83).

10.3 Dezintegrarea leptonului μ

Teoria interacţiunilor electroslabe, dezvoltată în paragraful precedent pe baza modelului Weinberg–Salam, ne permite calculul ratelor parţiale şi totale de dezintegrare a diferitelor particule elementare. Dintre procesele leptonice cele mai cunoscute, dezintegrarea particulei μ este considerată de referinţă, predicţiile teoretice având multiple confirmări experimentale – prin studiul spectrului energetic şi al distribuţiei unghiulare a electronilor emişi de μ-onii polarizaţi şi al elicităţii electronilor emişi de μ-onii nepolarizaţi –, în toate cazurile găsindu-se o foarte bună concordanţă între valorile teoretice şi cele experimentale. În continuare, ne propunem să prezentăm teoria acestei dezintegrări, ea servind ca model pentru studiul altor procese similare.

Dezintegrarea leptonului μ, de cuadriimpuls şi spin (p, r), într-un electron, de cuadriimpuls şi spin (p', r') şi în neutrinii corespunzători, de cuadriimpulsuri şi spini (q_1, r_1) şi (q_2, r_2), se face după schema:

$$\mu^-(p,r) \rightarrow e^-(p',r') + \bar{\nu}_e(q_1,r_1) + \nu_\mu(q_2,r_2)$$

BCU CLUJ CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

care este echivalentă cu

$$\mu^-(p,r) + \bar{\nu}_\mu(-q_2,r_2) \rightarrow e^-(p',r') + \bar{\nu}_e(q_1,r_1)\,,$$

reprezentabilă prin diagrama Feynman din figura 10.8. Amplitudinea acestui proces este dată de relaţia (10.25), adică

$$\mathcal{A} = \frac{1}{\sqrt{2VE_\mu}}\frac{1}{\sqrt{2VE_e}}\frac{1}{\sqrt{2VE_{\nu_e}}}\frac{1}{\sqrt{2VE_{\nu_\mu}}}(2\pi)^4\delta^4(p'+q_1+q_2-p)\,\mathcal{M}\,, \quad (10.91)$$

unde $\mathcal{M}$ se exprimă, aplicând regulile Feynman pentru particule şi antiparticule fermionice şi utilizând vertexurile din expresiile (10.80, 81), sub forma:

$$\begin{aligned}\mathcal{M} &= (-ig_W)\,\bar{v}_{\nu_\mu}(-q_2,r_2)\,\gamma_i(1-\gamma_5)\,u_\mu(p,r)\,\frac{-i\eta^{ij}}{k^2-m_W^2}\times \\ &\times(-ig_W)\bar{u}_e(p',r')\,\gamma_j(1-\gamma_5)\,v_{\nu_e}(q_1,r_1)\,. \end{aligned} \quad (10.92)$$

Aici, propagatorul fotonului, (10.24), a fost înlocuit cu expresia propagatorului unui bozon vectorial intermediar masiv, de masă m_W [7]. La energii mici, pentru care cuadriimpulsul lui W_i poate fi neglijat, adică $k^2 \ll m_W^2$, expresia (10.92) devine

$$\mathcal{M} = -\,i\,\frac{g_W^2}{m_W^2}\,\bar{v}_{\nu_\mu}(-q_2,r_2)\,\gamma_i(1-\gamma_5)u_\mu(p,r)\,\bar{u}_e(p',r')\,\gamma^i\,(1-\gamma_5)\,v_{\nu_e}(q_1,r_1) \quad (10.93)$$

şi coincide cu relaţia (10.54) a lagrangeianului celor patru fermioni, propus de Fermi, dacă introducem notaţia

$$\frac{G_F}{\sqrt{2}} \equiv \frac{g_W^2}{m_W^2}\,. \quad (10.94)$$

Pentru a evalua rata de dezintegrare, (10.41), vom efectua, în expresia

$$\begin{aligned}&|\mathcal{M}|^2 = \\ &= \frac{G_F^2}{2}\left[\bar{v}_{\nu_e}(q_1,r_1)\,\gamma_i(1-\gamma_5)\,u_e(p',r')\;\bar{u}_\mu(p,r)\,\gamma^i\,(1-\gamma_5)\,v_{\nu_\mu}(-q_2,r_2)\right]\times \\ &\times\left[\bar{v}_{\nu_\mu}(-q_2,r_2)\,\gamma_j(1-\gamma_5)\,u_\mu(p,r)\;\bar{u}_e(p',r')\,\gamma^j\,(1-\gamma_5)\,v_{\nu_e}(q_1,r_1)\right], \end{aligned} \quad (10.95)$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

medierea după spini în starea inițială și sumarea după spini în starea finală, adică

$$\frac{1}{2}\sum_{rr'r_1r_2}|\mathcal{M}|^2 = \frac{G_F^2}{4}\times$$
$$\times\sum\Big\{(\bar{v}_{\nu_e})_a\,(\gamma_i)_{ab}\,(1-\gamma_5)_{bc}\,(u_e)_c\,(\bar{u}_\mu)_d\,(\gamma^i)_{df}\,(1-\gamma_5)_{fg}\,(v_{\nu_\mu})_g\times$$
$$\times\,(\bar{v}_{\nu_\mu})_k\,(\gamma_j)_{kl}\,(1-\gamma_5)_{lm}\,(u_\mu)_m\,(\bar{u}_e)_n\,(\gamma^j)_{np}\,(1-\gamma_5)_{pt}\,(v_{\nu_e})_t\Big\}\,, \tag{10.96}$$

unde am introdus indicii de matrice $a\ldots t$. În expresia (10.96) vom aplica relațiile (10.49) și (10.50) și, neglijând masele neutrinilor, obținem [35]:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\sum_{rr'r_1r_2}|\mathcal{M}|^2 &= \frac{G_F^2}{4}\times\\ &\times\Big[(\hat{p}'+im_e)_{cn}\,(\gamma^j)_{np}\,(1-\gamma_5)_{pt}\,(\hat{q}_1)_{ta}\,(\gamma_i)_{ab}\,(1-\gamma_5)_{bc}\Big]\times\\ &\times\Big[(-\hat{q}_2)_{gk}\,(\gamma_j)_{kl}\,(1-\gamma_5)_{lm}\,(\hat{p}+im_\mu)_{md}\,(\gamma^i)_{df}(1-\gamma_5)_{fg}\Big] =\\ &= \frac{G_F^2}{4}\,\mathrm{Tr}\,\Big[(\hat{p}'+im_e)\,\gamma_j\,(1-\gamma_5)\,(\hat{q}_1)\,\gamma_i\,(1-\gamma_5)\Big]\times\\ &\times\mathrm{Tr}\,\Big[(-\hat{q}_2)\,\gamma^j\,(1-\gamma_5)\,(\hat{p}+im_\mu)\,\gamma^i(1-\gamma_5)\Big] =\\ &= \frac{G_F^2}{4}\,\mathrm{Tr}\,\Big[\hat{p}'\,\gamma_j\,\hat{q}_1\,\gamma_i\Big]\,\mathrm{Tr}\,\Big[-\hat{q}_2\,\gamma^j\,\hat{p}\,\gamma^i\Big] =\\ &= 64\,G_F^2\,(p\cdot q_1)\,(p'\cdot q_2)\,,\end{aligned} \tag{10.97}$$

unde am utilizat proprietățile (8.113–120) ale traselor produselor de matrice γ^i.

Presupunem că particula μ, care se dezintegrează, este în repaus, adică are cuadriimpulsul $p=(E=m_\mu,\,\vec{0})$, iar produșii de dezintegrare au cuadriimpulsurile:

$$\begin{aligned}p' &= (E',\,\vec{p}')\\ q_1 &= (E_1,\,\vec{q}_1)\\ q_2 &= (E_2,\,\vec{q}_2)\,.\end{aligned}$$

BCU IAȘI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Cu aceste rezultate, rata parţială de dezintegrare, (10.40), în care am efectuat sumarea şi medierea după spini, devine

$$d\Gamma = \frac{4\,G_F^2}{(2\pi)^5}\,\frac{1}{m_\mu}\,(p\cdot q_1)\,(p'\cdot q_2)\,\delta^4(p'+q_1+q_2-p)\,\frac{d\vec{p}\,'}{E'}\,\frac{d\vec{q}_1}{E_1}\,\frac{d\vec{q}_2}{E_2}\,. \tag{10.98}$$

Pentru a calcula rata totală de dezintegrare, vom utiliza, mai întâi, rezultatul [35]

$$\mathcal{I}^{ij} = \int q_1^i\,q_2^j\,\frac{d\vec{q}_1}{E_1}\,\frac{d\vec{q}_2}{E_2} = \frac{\pi}{6}(2\,q^i q^j + \eta^{ij}q^2)\,,\ \text{unde}\ q = q_1+q_2\,, \tag{10.99}$$

şi, integrând după impulsurile neutrinilor, avem:

$$\int_{q_1 q_2} d\Gamma = \frac{G_F^2}{3(2\pi)^4}\,\frac{1}{m_\mu}\left[(p\cdot p')q^2 + 2(p\cdot q)(p'\cdot q)\right]\frac{d\vec{p}\,'}{E'}\,. \tag{10.100}$$

În (10.100), efectuăm înlocuirile:

$$\begin{aligned}
&d\vec{p}\,' = 4\pi|\vec{p}\,'|^2\,|d\vec{p}\,'| = 4\pi E'^2\,dE' \Rightarrow \frac{d\vec{p}\,'}{E'} = 4\pi E'\,dE'\\
&p\cdot p' = m_\mu E'\\
&p\cdot q = p\cdot(p-p') = m_\mu(m_\mu - E')\\
&q^2 = (p-p')^2 = m_\mu^2 - 2m_\mu E'\\
&p'\cdot q = p'\cdot(p-p') = m_\mu E'\,,
\end{aligned}$$

unde am neglijat termenii în m_e^2, şi, integrând pe domeniul complet al energiei electronului emis, adică $0 \le E' \le \frac{1}{2}m_\mu$, obţinem:

$$\Gamma = \int_0^{\frac{1}{2}m_\mu} \frac{4\pi}{3}\,\frac{G_F^2}{(2\pi)^4}\,m_\mu\,(E')^2\,(3m_\mu - 4E')\,dE'\,,$$

adică

$$\Gamma = \frac{1}{\tau_\mu} = \frac{G_F^2\,m_\mu^5}{192\,\pi^3}\,. \tag{10.101}$$

Înlocuind

$$m_\mu = 105,7\ \text{MeV}$$

şi

$$\tau_\mu = 2,2\cdot 10^{-6}\ \text{s}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

în ultima relaţie, rezultă constanta Fermi ca fiind

$$G_F = 1,16 \times 10^{-5}\ \text{GeV}^{-2} = 1,02 \times 10^{-5}/m_p^2, \qquad (10.102)$$

unde m_p este masa protonului. Aceasta ne permite să evaluăm o constantă ce caracterizează interacţiunea slabă, a cărei valoare numerică,

$$\alpha_W = \frac{g_W^2}{4\pi} = \frac{G_F}{4\pi\sqrt{2}} \left(\frac{m_W}{m_p}\right)^2 \approx 3.8 \times 10^{-3},$$

pentru $m_W \approx 80$ GeV, este comparabilă cu constanta structurii fine,

$$\alpha_e = \frac{e^2}{4\pi} = \frac{1}{137} = 7,3 \cdot 10^{-3}.$$

La aproximativ aceeaşi valoare a constantei α_W se ajunge dacă înlocuim pe g_W din relaţiile (10.76), adică

$$g_W = \frac{g}{2\sqrt{2}} = \frac{|e|}{2\sqrt{2}\sin\theta_W},$$

şi obţinem

$$\alpha_W = \frac{|e|^2}{32\pi \sin^2\theta_W} \approx 3,96 \times 10^{-3},$$

pentru valoarea experimentală [7]

$$\sin^2\theta_W \approx 0,23.$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Bibliografie

[1] Aitchison, I.J.R., and Hey, A.J.G. (1982) *Gauge Theories in Particle Physics*, Bristol: Adam Hilger.

[2] Avram, N.M., şi Drăgănescu, G.E. (1989) *Mecanică Cuantică. Probleme*, Timişoara: Ed. Univ.

[3] Bjorken, J.D., and Drell, S.D. (1964) *Relativistic Quantum Mechanics*, New York: McGraw-Hill.

[4] Bohr, N. (1929) *Wirkungsquanten und Naturbeschreibung. Die Naturwissenschaften* **17**, 483.

[5] Born, M. (1926) *Zeitschr. Phys.* **37**, 863; **38**, 803.

[6] Bransden, B.H., şi Joachain, C.J. (1995) *Introducere în mecanica cuantică* (traducere), Bucureşti: Ed. Tehnică.

[7] Cheng, T.P., and Li, L.F. (1984) *Gauge theory of elementary particle physics*, Oxford: Clarendon Press.

[8] Cohen-Tannoudji, C., Diu, B., and Laloë, F. (1977) *Mécanique quantique.* Tome I, Paris: Hermann.

[9] Constantinescu, F., şi Magyari, E. (1968) *Mecanică cuantică. Probleme*, Bucureşti: Ed. Tehnică.

[10] Cotăescu, I.I. (1990) *Curs de Mecanică Cuantică*, Timişoara: Ed. Univ.

[11] de Broglie, L. (1924) *Thèse de doctorat*, Paris: Mason;
(1924) *Phil. Mag.* 4F, 446;
(1925) *Ann de Phys* **3** 22;

POLITEHNICA UNIVERSITY LIBRARY

[14] DeWitt, B.S. (1963) în *Dynamical Theory of Groups and Fields*, 1963 Les Houches Summer School ;
(1967) *Phys. Rev.* **162**, 1239.

[15] Dirac, P.A.M. (1928) *Proc. Roy. Soc.* **117**, 610;
(1958) *The Principles of Quantum Mechanics*, Oxford: Clarendon Press.

[16] Einstein, A., şi Infeld, L. (1957) *Evoluţia fizicii*, Bucureşti: Ed. Tehnică.

[17] Fadeev, L.D., and Popov, V.N. (1967) *Phys. Lett.* **25B**, 29.

[18] Feynman, R.P. (1948) *Rev. Mod. Phys.* **20**, 267.

[19] Feynman, R.P. (1963) *Acta Phys. Polon.* **XXIV**, 697.

[20] Florescu, Viorica. *Mecanică Cuantică*, Vol.I (1979), Vol.II (1981), Bucureşti: Tipografia Univ.

[21] Freund, G.O. (1986) *Introduction to Supersymmetry*, Cambridge: Cambridge Univ. Press.

[22] Fritzsch, H., Gell-Mann, M., and Leutwyler, H. (1973) *Phys. Lett* **B47**, 365.

[23] Fulling, S.A. (1989) *Aspects of Quantum Field Theory in Curved Space-Time*, Cambridge: Cambridge Univ. Press.

[24] Gottlieb, I. (1973) *Mecanică cuantică*, Iaşi: Tipografia Univ. Al. I. Cuza.

[25] Gottlieb, I. (1982) *Mecanică cuantică.* Fascicola 1, Iaşi: Tipografia Univ. Al. I. Cuza.

[26] Gottlieb, I., Dariescu, C., şi Dariescu, M.A. (1997) *Fundamentarea Mecanicii Cuantice*, Chişinău: Tehnica.

[27] Gottlieb, I., Ţaţomir, D., şi Stamate, M. (1997) *Complemente de mecanică cuantică*, Bacău: Plumb.

[28] Gottlieb, I., Dariescu, M.A., şi Dariescu, C. (1999) *Mecanică cuantică*, Iaşi: BIT.

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

[29] Heisenberg, W. (1927) *Zeitschr. Phys.* **43**, 172;
(1930) *Die physikalischen Prinzipien der Quantenmechanik*, Berlin: Hirzel;
(1955) în *Niels Bohr and the development of physics*, New York: McGraw-Hill.

[30] Jauch, J.M. (1968) *Foundations of quantum mechanics*, Massachusetts: Reading.

[31] Kaku, M. (1993) *Quantum Field Theory. A Modern Introduction*, Oxford: Oxford Univ. Press.

[32] Kastler, A. (1982) *Această stranie materie.* Seria Idei Contemporane, Bucureşti: Ed. Politică.

[33] Landau, L.D., and Lifchitz, E.M. (1973) *Électrodynamique quantique. Physique théorique IV*, Moscou: MIR.

[34] Landau, L.D., and Lifchitz, E.M. (1980) *Mécanique quantique. (Théorie non relativiste). Physique théorique III*, Moscou: MIR.

[35] Mandl, F., and Shaw, G. (1994) *Quantum Field Theory*, New York: Wiley.

[36] Messiah, A. (1962) *Quantum mechanics* (traducere), New York: Wiley.

[37] Novacu, V. (1984) *Teoria Cuantică a Câmpurilor*, Bucureşti: Ed. Tehnică.

[38] Peebles, P.J.E. (1992) *Quantum mechanics*, New Jersey and Oxford: Princeton Univ. Press.

[39] Planck, M. (1925) *De la relativ la absolut.* Severnîi peceatnic, Vologdo.

[40] Prugovecki, E. (1971) *Quantum mechanics in Hilbert space*, S. Eilenberg and H. Bass (Eds.), New York: Academic Press.

[41] Ramond, P. (1981) *Field Theory. A Modern Primer*, Reading: Benjamin/Cummings.

[42] Salam, A. (1957) *Il Nuovo Cimento* **5**, 299;
(1969) *Elementary Particle Theory*, ed. N. Svartholm, Stockholm: Almquist and Wiksells.

ALEXANDRU IOAN CUZA UNIVERSITY LIBRARY

[43] Schrödinger, E. (1926) *Ann. Phys.* **79**, 361; 489; 734; **80**, 437; **81**, 237; (1928) *Abhandlungen zur Wellenmechanik.*, A. Barth (Ed.), Leipzig.

[44] Sokolov, A.A., Ternov, I.M., and Zhukovskii, V.Ch. (1984) *Quantum mechanics*, Moscow: MIR.

[45] Ţiţeica, Ş. (1984) *Mecanică Cuantică*, Bucureşti: Ed. Acad. RSR.

[46] von Laue, M. (1963) *Istoria fizicii*, Bucureşti: Ed. Ştiinţifică.

[47] Weyl, H. (1950) *Phys. Rev.* **77**, 699.

[48] Wu, T.Y., and Pauchy Hwang, W.Y. (1991) *Relativistic Quantum Mechanics and Quantum Fields*, Singapore: World Scientific.

[49] Yang, C.N., and Mills, R.L. (1954) *Phy. Rev.* **96**, 191.

[50] Zăgănescu, M. (1972) *Mecanică Cuantică* (2 Volume + 2 Volume Anexe), Timişoara: Tipografia Univ.

[51] Zet, G. (1998) *Simetrii unitare şi teorii gauge*, Iaşi: Ed. Gh. Asachi.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

ANEXE

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Anexa A

A1. Polinoame Hermite

Polinoamele Hermite de gradul n, $H_n(x)$, se definesc prin relaţia:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x^2}\right) \tag{1}$$

şi au reprezentarea integrală

$$H_n(x) = \frac{\sqrt{2^n}}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} (x+it)^n e^{-t^2}\, dt\,. \tag{2}$$

Funcţia

$$w(x,t) = e^{2xt-t^2} = e^{x^2} e^{-(x-t)^2} \tag{3}$$

se numeşte *funcţie generatoare* a polinoamelor Hermite deoarece, în dezvoltarea în serie a lui $w(x,t)$ după puterile lui t, coeficientul lui t^n este proporţional cu $H_n(x)$, adică

$$w(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} H_n(x) t^n\,. \tag{4}$$

Derivând funcţia generatoare, pe rând, în raport cu variabilele t şi x, obţinem *relaţiile de recurenţă*

$$H_{k+1} - 2x\, H_k + 2k\, H_{k-1} = 0\,, \quad \text{pentru } k = 1, 2, 3, \ldots \tag{5}$$

şi respectiv

$$H'_k - 2k\, H_{k-1} = 0\,, \quad \text{pentru } k = 1, 2, 3, \ldots \tag{6}$$

care ne permit deducerea *ecuaţiei diferenţiale* a polinoamelor Hermite:

$$H''_n - 2x\, H'_n + 2n\, H_n = 0\,. \tag{7}$$

Deci, ecuaţia diferenţială

$$y'' - 2x\, y' + a\, y = 0\,, \tag{8}$$

cu $a = const.$, are ca soluţii polinoamele Hermite $H_n(x)$ dacă a este un număr natural par, adică $a = 2n$.

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

În probleme concrete, este utilă atât cunoaşterea dezvoltărilor asimptotice

$$\begin{aligned} H_{2n}(x) &= (-1)^n\, 2^n\, (2n-1)!!\, e^{x^2/2} \\ &\times \left[\cos\left(\sqrt{4n+1}\, x\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^{1/4}}\right)\right] \qquad (9) \\ H_{2n+1}(x) &= (-1)^n\, 2^{n+1/2}\, (2n-1)!!\sqrt{2n+1}\, e^{x^2/2} \\ &\times \left[\sin\left(\sqrt{4n+3}\, x\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{n^{1/4}}\right)\right] \qquad (10) \end{aligned}$$

cât şi a expresiilor şi valorilor particulare:

$$\begin{aligned} &\text{(a)} \quad H_0(x) = 1\,, \\ &\text{(b)} \quad H_1(x) = 2x\,, \\ &\text{(c)} \quad H_2(x) = 4x^2 - 2\,, \\ &\text{(d)} \quad H_3(x) = 8x^3 - 12x\,, \\ &\text{(e)} \quad H_4(x) = 16x^4 - 48x^2 + 12\,, \\ &\text{(f)} \quad H_5(x) = 32x^5 - 160x^3 + 120x\,, \\ &\text{(g)} \quad H_{2n}(0) = (-1)^n\, 2^n\, (2n-1)!!\,, \\ &\text{(h)} \quad H_{2n+1}(0) = 0\,. \end{aligned} \qquad (11)$$

Ataşăm polinoamelor Hermite *funcţiile asociate Hermite*, definite prin

$$u_n(x) = C_n\, e^{-x^2/2}\, H_n(x)\,, \qquad (12)$$

ce formează un şir ortonormal de funcţii, adică

$$\int_{-\infty}^{\infty} u_k(x) u_n(x)\, dx = \delta_{kn}\,, \qquad (13)$$

unde δ_{kn} este simbolul Kronecker

$$\delta_{kn} = \begin{cases} 1\,, & \text{pentru} \quad k = n\,, \\ 0\,, & \text{pentru} \quad k \neq n\,, \end{cases} \qquad (14)$$

iar constantele de normare, C_n, au expresiile

$$C_n = \left(2^n n! \sqrt{\pi}\right)^{-1/2}\,. \qquad (15)$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Explicitând pe $H_n(x)$ din (12) şi înlocuindu-l în (5) şi (6), obţinem *relaţiile de recurenţă*

$$xu_n = \sqrt{\frac{n+1}{2}}\,u_{n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}}\,u_{n-1} \tag{16}$$

$$u_n' = -\sqrt{\frac{n+1}{2}}\,u_{n+1} + \sqrt{\frac{n}{2}}\,u_{n-1} \tag{17}$$

iar, din (7), rezulă imediat ecuaţia diferenţială a funcţiilor asociate

$$u_n'' + (2n+1-x^2)u_n = 0\,. \tag{18}$$

Funcţiile Hermite au o importanţă deosebită în studiul oscilatorului liniar armonic cu ajutorul ecuaţiei Schrodinger (vezi paragraful 1.4.2). Aici, s-a efectuat schimbarea de variabilă $\xi = \beta x$, unde $\beta^2 = m\omega/\hbar$. Pentru a găsi relaţiile la care se supun funcţiile de undă, vom considera şirul

$$\psi_n(x) = A_n\, u_n(\beta x) \tag{19}$$

şi, înlocuind în relaţiile de mai sus pe βx cu ξ, vom obţine că $A = \sqrt{\beta}$ asigură ortonormalitatea şirului (19), adică funcţiile

$$\psi_n(x) = (2^n n!\sqrt{\pi}/\beta)^{-1/2}\, e^{-\beta^2 x^2/2}\, H_n(\beta x) \tag{20}$$

satisfac relaţia

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_k(x)\psi_n(x)\,dx = \delta_{kn}\,. \tag{21}$$

În sfârşit, relaţiile de recurenţă (16, 17) devin

$$x\psi_n(x) = \frac{1}{\beta}\sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\psi_{n+1}(x) + \frac{1}{\beta}\sqrt{\frac{n}{2}}\,\psi_{n-1}(x) \tag{22}$$

$$\frac{d\psi_n(x)}{dx}(x) = -\beta\sqrt{\frac{n+1}{2}}\,\psi_{n+1}(x) + \beta\sqrt{\frac{n}{2}}\,\psi_{n-1}(x)\,, \tag{23}$$

iar ecuaţia diferenţială la care se supun funcţiile $\psi_n(x)$ este

$$\frac{1}{\beta^2}\frac{d^2\psi_n}{dx^2} + (2n+1-\beta^2x^2)\psi_n = 0\,. \tag{24}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

A2. Polinoame Legendre

Polinoamele Legendre de gradul n, $P_n(x)$, se definesc prin relaţia:

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}\left[\left(x^2-1\right)^n\right] \tag{25}$$

şi au *funcţia generatoare*

$$\begin{aligned} w(x,t) &= (1-2tx+t^2)^{-1/2} = \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} t^k P_k(x)\,, \text{ pentru } |t| < \min|x \pm \sqrt{x^2-1}| \\ &= \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{t^{k+1}} P_k(x)\,, \text{ pentru } |t| > \max|x \pm \sqrt{x^2-1}|\,. \end{aligned} \tag{26}$$

Scriind relaţia (26) sub forma

$$(1-2t\,x+t^2)w^2 = 1 \tag{27}$$

pe care o derivăm, pe rând, în raport cu t şi x, obţinem *relaţiile de recurenţă*

$$(n+1)P_{n+1} - (2n+1)x\,P_n + n\,P_{n-1} = 0 \tag{28}$$

şi, respectiv,

$$P'_{n+1} - 2xP'_n + P'_{n-1} - P_n = 0\,, \tag{29}$$

cu $P'_0 = 0$ şi $P'_1 = P_0$. Relaţiile de recurenţă ne permit deducerea *ecuaţiei diferenţiale* a polinoamelor Legendre:

$$\left[\left(1-x^2\right)P'_n\right]' + n(n+1)P_n = 0\,. \tag{30}$$

Cu alte cuvinte, ecuaţia diferenţială

$$[(1-x^2)u']' + n(n+1)u = 0\,, \tag{31}$$

cu $n = 0, 1, 2, \ldots$, are ca soluţii polinoamele Legendre $P_n(x)$.

Se demonstrează ca polinoamele Legendre $P_n(x)$ se supun relaţiei integrale

$$\int_{-1}^{+1} P_k(x)P_n(x)\,dx = \frac{2}{2n+1}\delta_{kn}\,, \tag{32}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

formând un set complet şi ortogonal de funcţii în intervalul $(-1, +1)$.

În continuare, dăm valori particulare indicelui n şi avem expresiile:

(a) $P_0(x) = 1$,

(b) $P_1(x) = x = \cos\varphi$,

(c) $P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1) = \frac{1}{4}(3\cos 2\varphi + 1)$,

(d) $P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) = \frac{1}{8}(5\cos 3\varphi + 3\cos\varphi)$,

(e) $P_4(x) = \frac{1}{8}(35x^4 - 30x^2 + 3) = \frac{1}{64}(35\cos 4\varphi + 20\cos 2\varphi + 9)$,

(f) $P_5(x) = \frac{1}{8}(63x^5 - 70x^3 + 15) = \frac{1}{128}(63\cos 5\varphi + 35\cos 3\varphi + 30\cos\varphi)$,

menţionând şi inegalităţile

(a) $P_0(x) < P_1(x) < P_2(x) < \ldots < P_n(x) < \ldots$, pentru $x > 1$

(b) $P_0(x) + P_1(x) + \ldots + P_n(x) > 0$, pentru $x > -1$

(c) $[P_n(\cos\varphi)]^2 > \dfrac{\sin(2n+1)\varphi}{(2n+1)\sin\varphi}$, pentru $0 < \varphi < \pi$

(d) $\sqrt{n\sin\varphi}\,|P_n(\cos\varphi)| \leq 1$

(e) $|P_n(\cos\varphi)| \leq 1$. (33)

În ecuaţia (30) schimbăm indicele n cu ℓ şi o derivăm de k ori. Utilizând formula lui Leibniz şi aranjând convenabil termenii, ajungem la ecuaţia diferenţială

$$\left[(1-x^2)y'\right]' + \left[\ell(\ell+1) - \frac{k^2}{1-x^2}\right] y = 0 \tag{34}$$

ale cărei soluţii,

$$y = (-1)^k (1-x^2)^{k/2} P_\ell^{(k)}(x), \tag{35}$$

sunt *funcţiile asociate Legendre* şi se notează cu $P_\ell^k(x)$. Numerele ℓ şi k, cu $\ell = 0, 1, 2, \ldots$ şi $k = 0, 1, 2, \ldots, \ell$, se numesc respectiv *gradul* şi *ordinul* funcţiei. Pentru un k fixat, funcţiile asociate Legendre formează un set ortogonal de funcţii pe intervalul $(-1, +1)$ adică

$$\int_{-1}^{+1} P_\ell^k(x)\, P_{\ell'}^k(x)\, dx = \frac{(\ell+k)!}{(\ell-k)!}\,\frac{2}{2\ell+1}\,\delta_{\ell\ell'} \tag{36}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

şi satisfac următoarele relaţii de recurenţă:

$$\begin{aligned}(2\ell+1)xP_\ell^k &= (\ell+1-k)P_{\ell+1}^k + (\ell+k)P_{\ell-1}^k\,;\\ (1-x^2)\frac{d}{dx}P_\ell^k &= -\ell x P_\ell^k + (\ell+k)P_{\ell-1}^k = \\ &= (\ell+1)xP_\ell^k - (\ell+1-k)P_{\ell+1}^k\,,\end{aligned} \tag{37}$$

cu convenţia $P_{-\ell} = 0$ dacă $\ell > 0$.

În aplicaţii concrete, este utilă cunoaşterea următoarelor expresii şi valori particulare:

$$\begin{aligned}
&\text{(a)}\quad P_1^1(x) = -(1-x^2)^{1/2} = -\sin\varphi\,,\\
&\text{(b)}\quad P_2^1(x) = -3(1-x^2)^{1/2}x = -\frac{3}{2}\sin 2\varphi\,,\\
&\text{(c)}\quad P_2^2(x) = 3(1-x^2) = \frac{3}{2}(1-\cos 2\varphi)\,,\\
&\text{(d)}\quad P_3^1(x) = -\frac{3}{2}(1-x^2)^{1/2}(5x^2-1) = -\frac{3}{8}(\sin\varphi + 5\sin 3\varphi)\,,\\
&\text{(e)}\quad P_3^2(x) = 15(1-x^2)x = \frac{15}{4}(\cos\varphi - \cos 3\varphi)\,,\\
&\text{(f)}\quad P_3^3(x) = -15(1-x^2)^{3/2} = -\frac{15}{4}(3\sin\varphi - \sin 3\varphi)\,,\\
&\text{(g)}\quad P_\ell^k(1) = P_\ell^k(-1) = 0\,,\ k \neq 0\,,\\
&\text{(h)}\quad P_\ell^k(0) = \begin{cases} (-1)^p \frac{(2p+2k)!}{2^\ell\, p!\,(p+k)!} & ,\ \ell - k = 2p \\ 0 & ,\ \ell - k = 2p+1\,. \end{cases}
\end{aligned} \tag{38}$$

Se constată că, pentru întregi impari $k \leq \ell$, funcţiile $P_\ell^k(x)$ nu sunt polinoame în sensul strict, ele conţinând puteri ale lui $\sqrt{1-x^2}$. Pentru $k = \ell$, avem expresia $P_\ell^\ell = (2\ell-1)!!(1-x^2)^{1/2}$. În cazul particular $k = 0$, funcţiile $P_\ell^k(x)$ se reduc la polinoamele $P_\ell(x)$.

După cum vom vedea în paragraful următor, un interes deosebit îl prezintă soluţiile ecuaţiei (34) ce corespund valorilor variabilei reale x situate pe segmentul $-1 \leq x \leq 1$. Cu ajutorul schimbării de variabilă

$$x = \cos\theta \tag{39}$$

ecuaţia diferenţială (34), cu

$$\frac{d}{dx} = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\,, \tag{40}$$

devine

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{dy}{d\theta}\right)+\left[\ell(\ell+1)-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right]y=0\,, \tag{41}$$

unde k a fost înlocuit cu numărul întreg m ce poate lua atât valori pozitive cât şi negative. Definind

$$P_\ell^{-m}(x)=P_\ell^m(x) \tag{42}$$

soluţiile ecuaţiei (41) sunt funcţiile

$$y\equiv\Theta_{\ell m}(\theta)=C_\ell^m P_\ell^m(\cos\theta)\,, \tag{43}$$

ce satisfac relaţia de ortonormalitate

$$\int_0^\pi \Theta_{\ell m}(\theta)\,\Theta_{\ell' m}(\theta)\sin\theta\,d\theta=\delta_{\ell\ell'}\,. \tag{44}$$

Constanta de normare,

$$C_\ell^m=(-1)^{\frac{m+|m|}{2}}\left[\frac{2\ell+1}{2}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{1/2}, \tag{45}$$

conţine factorul de fază $(-1)^{(m+|m|)/2}$ introdus în mod convenţional.

A3. Funcţii sferice

Operatorul Laplace este definit în coordonate carteziene rectangulare ca fiind

$$\Delta=\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}\,. \tag{46}$$

În coordonate sferice, el devine

$$\Delta=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \tag{47}$$

şi se reduce, pentru sfera de rază $r=1$, la expresia

$$\tilde{\Delta}=\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\,. \tag{48}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Să explicităm, în continuare, soluţiile ecuaţiei diferenţiale

$$\tilde{\Delta} Y = -\ell(\ell+1) Y\,, \tag{49}$$

cu $\ell = 0,\ 1,\ 2, \ldots$. Aplicând metoda separării variabilelor,

$$Y(\theta, \varphi) = \Theta(\theta)\, \phi(\varphi)\,, \tag{50}$$

ecuaţia (49), printr-o rearanjare convenabilă a termeilor, se reduce la două ecuaţii independente pentru variabilele θ şi φ:

$$\begin{aligned} &\text{(a)} \quad \frac{1}{\Theta}\left[\sin\theta \frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta \frac{d\Theta}{d\theta}\right)\right] + \ell(\ell+1)\sin^2\theta = A \\ &\text{(b)} \quad \frac{1}{\phi}\frac{d^2\phi}{d\varphi^2} = -A\,, \end{aligned} \tag{51}$$

unde A este o constantă. Ecuaţia (51.b) are soluţia generală

$$\phi(\varphi) = C_1 e^{\sqrt{-A}\,\varphi} + C_2 e^{-\sqrt{-A}\,\varphi}\,, \tag{52}$$

unde C_1 şi C_2 sunt două constante de integrare. Impunem ca ϕ să fie o funcţie periodică de φ, cu perioada 2π şi avem:

$$A = m^2, \ \text{cu} \ m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{53}$$

Se verifică uşor că setul de soluţii

$$\phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \tag{54}$$

se supune relaţiei

$$\int_0^{2\pi} \phi_m(\varphi)\, \phi_{m'}(\varphi)\, d\varphi = \delta_{mm'}\,. \tag{55}$$

Considerând $A = m^2$ în (51.a), obţinem ecuaţia diferenţială (41) ale cărei soluţii sunt funcţiile Legendre asociate (43).

În concluzie, ecuaţia diferenţială (49) admite setul de soluţii

$$\begin{aligned} Y_\ell^m(\theta, \varphi) &= \Theta_{\ell m}(\theta)\, \phi_m(\varphi) = \\ &= (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}\right]^{1/2} P_\ell^m(\cos\theta)\, e^{im\varphi}\,, \end{aligned} \tag{56}$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

numite *funcţii sferice*. Acestea sunt funcţii univoce şi lipsite de singularităţi, formând un set complet şi ortogonal pe sfera unitară

$$\int \bar{Y}_{\ell'}^{m'}(\theta,\varphi)\, Y_{\ell}^{m}(\theta,\varphi)\, \sin\theta\, d\theta\, d\varphi = \delta_{\ell'\ell}\, \delta_{m'm} \tag{57}$$

şi satisfac următoarele relaţii de recurenţă:

$$\begin{aligned}
\cos\theta\, Y_{\ell}^{m} &= \left[\frac{(\ell+m+1)(\ell-m+1)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}\right]^{1/2} Y_{\ell+1}^{m} \\
&+ \left[\frac{(\ell+m)(\ell-m)}{(2\ell+1)(2\ell-1)}\right]^{1/2} Y_{\ell-1}^{m} \\
\sin\theta\, Y_{\ell}^{m} &= \left\{-\left[\frac{(\ell-m+1)(\ell-m+2)}{(2\ell+1)(2\ell+3)}\right]^{1/2} Y_{\ell+1}^{m-1}\right. \\
&+ \left.\left[\frac{(\ell+m)(\ell+m-1)}{(2\ell+1)(2\ell-1)}\right]^{1/2} Y_{\ell-1}^{m-1}\right\} e^{i\varphi}\,.
\end{aligned} \tag{58}$$

În probleme practice, cum ar fi explicitarea funcţiilor de undă ale ionului hidrogenoid, sunt utile următoarele forme particulare

$$\begin{aligned}
Y_{\ell}^{0} &= \sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}}\, P_{\ell}(\cos\theta)\,, \\
Y_{\ell}^{\ell} &= (-1)^{\ell}\left[\frac{2\ell+1}{4\pi}\,\frac{(2\ell)!}{2^{2\ell}\,(\ell!)^2}\right]^{1/2} \sin^{\ell}\theta\, e^{i\ell\varphi}
\end{aligned} \tag{59}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

precum şi expresiile primelor funcţii sferice

$$
\begin{aligned}
&\text{(a)}\quad Y_0^0 = \frac{1}{\sqrt{4\pi}}\,,\\
&\text{(b)}\quad Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta\,,\\
&\text{(c)}\quad Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}}\,(3\cos^2\theta - 1)\,,\\
&\text{(d)}\quad Y_3^0 = \sqrt{\frac{7}{16\pi}}\,(5\cos^3\theta - 3\cos\theta)\,,\\
&\text{(e)}\quad Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\,\sin\theta\, e^{i\varphi}\,,\\
&\text{(f)}\quad Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\,\sin\theta\,\cos\theta\, e^{i\varphi}\,,\\
&\text{(g)}\quad Y_3^1 = -\sqrt{\frac{21}{64\pi}}\,\sin\theta(5\cos^2\theta - 1)\, e^{i\varphi}\,,\\
&\text{(h)}\quad Y_2^2 = \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\,\sin^2\theta\, e^{2i\varphi}\,,\\
&\text{(i)}\quad Y_3^2 = \sqrt{\frac{105}{32\pi}}\,\cos\theta\sin^2\theta\, e^{2i\varphi}\,,\\
&\text{(j)}\quad Y_3^3 = -\sqrt{\frac{35}{64\pi}}\,\sin^3\theta\, e^{3i\varphi}\,.
\end{aligned}
\tag{60}
$$

A4. Polinoame Laguerre asociate

Polinoamele Laguerre asociate de gradul k, $L_k^{(s)}(x)$, se definesc prin relaţia:

$$
L_k^{(s)}(x) = \frac{1}{k!}\,x^{-s}\,e^x\,\frac{d^k}{dx^k}\left(e^{-x}\,x^{k+s}\right) \tag{61}
$$

iar pentru $s = 0$ se obţin polinoamele Laguerre uzuale

$$
L_k(x) = L_k^{(0)}(x)\,. \tag{62}
$$

Funcţia generatoare

$$
w(x,t) = (1-t)^{-s-1}\,e^{-\frac{xt}{1-t}} \tag{63}
$$

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

se poate scrie, pentru $|t| < 1$, sub forma următoarei dezvoltări în serie după puterile lui t

$$w(x,t) = \sum_{n=0}^{\infty} L_n^{(s)}(x) t^n . \tag{64}$$

Derivând funcţia generatoare în raport cu variabilele t şi x, obţinem *relaţiile de recurenţă*

$$(k+1)L_{k+1}^{(s)} + (x-2k-s-1)\,L_k^{(s)} + (k+s)\,L_{k-1}^{(s)} = 0 \tag{65}$$

şi respectiv

$$L_{k+1}^{(s)\prime} - L_k^{(s)\prime} + L_k^{(s)} = 0 , \tag{66}$$

care ne permit deducerea *ecuaţiei diferenţiale* a polinoamelor asociate Laguerre:

$$x\,L_k^{(s)\prime\prime} - (x-s-1)\,L_k^{(s)\prime} + k\,L_k^{(s)} = 0 . \tag{67}$$

Această ecuaţie a fost obţinută în paragraful 1.4.4 dedicat studiului ionului hidrogenoid. Pentru construirea expresiilor concrete ale funcţiei radiale R_{nl}, cu $n = 0$ şi $n = 1$, ne sunt necesare următoarele valori particulare:

$$\begin{aligned}
&\text{(a)} \quad L_0^{(1)}(ax) = L_0^{(3)}(ax) = L_0^{(5)}(ax) = 1 , \\
&\text{(b)} \quad L_1^{(1)}(ax) = 2 - ax , \\
&\text{(c)} \quad L_1^{(3)}(ax) = 4 - ax , \\
&\text{(d)} \quad L_2^{(1)}(ax) = \frac{1}{2}\,(6 - 6ax + a^2x^2) .
\end{aligned} \tag{68}$$

Polinoamele asociate Laguerre formează, pe intervalul $[0, \infty)$, un şir ortogonal de funcţii cu ponderea $e^{-x}\,x^s$, adică

$$\int_0^{\infty} e^{-x}\,x^s\,L_k^{(s)}(x) L_p^{(s)}(x)\,dx = \frac{(s+k)!}{k!}\,\delta_{kp} . \tag{69}$$

A5. Funcţii hipergeometrice

Seria hipergeometrică se defineşte prin:

$$\begin{aligned}
F(\alpha, \beta; \gamma; z) \;=\; & 1 + \frac{\alpha\cdot\beta}{\gamma\cdot 1} z + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)1\cdot 2} z^2 + \\
& + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)\beta(\beta+1)(\beta+2)}{\gamma(\gamma+1)(\gamma+2)1\cdot 2\cdot 3} z^3 + \ldots
\end{aligned} \tag{70}$$

BCU IAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Dacă $\alpha = -n$ sau $\beta = -n$, cu $n = 0, 1, 2, \ldots$, $F(\alpha, \beta; \gamma; z)$ se reduce la un polinom de gradul n. Ecuaţia diferenţială *hipergeometrică*

$$z(1-z)\,u'' + [\gamma - (\alpha+\beta+1)z]\,u' - \alpha\beta u = 0 \tag{71}$$

are, în interiorul cercului de rază unu, $|z| < 1$, soluţiile liniar independente

$$u_1 = F(\alpha, \beta; \gamma; z) \tag{72}$$
$$u_2 = z^{1-\gamma} F(\alpha-\gamma+1, \beta-\gamma+1; 2-\gamma; z)\,, \tag{73}$$

dacă γ nu este un număr întreg.

În practică, se ajunge foarte des la ecuaţii diferenţiale de tipul

$$z\,u'' + (\gamma - z)\,u' - \alpha u = 0\,. \tag{74}$$

Acestea au soluţiile liniar independente:

$$u_1(z) = {}_1F_1(\alpha; \gamma; z)\,,$$
$$u_2(z) = z^{1-\gamma}\,{}_1F_1(\alpha-\gamma+1; 2-\gamma; z)\,, \tag{75}$$

unde

$${}_1F_1(\alpha; \gamma; z) = 1 + \frac{\alpha}{\gamma}\frac{z}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{z^2}{2!} + \frac{\alpha(\alpha+1)(\alpha+2)}{\gamma(\gamma+1)(\gamma+2)}\frac{z^3}{3!} + \ldots \tag{76}$$

se numeşte *funcţie hipergeometrică degenerată.*

Funcţiile elementare pot fi exprimate cu ajutorul funcţiilor hipergeometrice

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

prin relaţii de tipul:

$$\text{(a)}\quad F(-n,\,\beta;\,\beta;\,-z) = (1+z)^n$$

$$\text{(b)}\quad F\left(-\frac{n}{2}, -\frac{n-1}{2}; \frac{1}{2}; \frac{z^2}{t^2}\right) = \frac{(t+z)^n + (t-z)^n}{2\,t^n}$$

$$\text{(c)}\quad F\left(1-n,\,1;\,2;\,-\frac{z}{t}\right) = \frac{(t+z)^n - t^n}{nz\,t^{n-1}}$$

$$\text{(d)}\quad F(1,\,1;\,2;\,-z) = \frac{\ln(1+z)}{z}$$

$$\text{(e)}\quad F\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}; \frac{3}{2}; \sin^2 z\right) = \frac{z}{\sin z}$$

$$\text{(f)}\quad F\left(\frac{1}{2}, 1; \frac{3}{2}; -\tan^2 z\right) = \frac{z}{\tan z}$$

$$\text{(g)}\quad F\left(\frac{n+1}{2}, -\frac{n-1}{2}; \frac{3}{2}; \sin^2 z\right) = \frac{\sin nz}{n \sin z}$$

$$\text{(h)}\quad F\left(\frac{n}{2}, -\frac{n}{2}; \frac{1}{2}; \sin^2 z\right) = \cos nz$$

$$\text{(i)}\quad {}_1F_1(\alpha;\,\alpha;\,z) = e^z\,. \tag{77}$$

De asemenea, există relaţii de legătură între funcţiile hipergeometrice şi polinoamele discutate în paragrafele anterioare. Astfel, polinoamele Hermite se exprimă cu ajutorul seriilor hipergeometrice degenerate prin:

$$\text{(a)}\quad H_{2n}(x) = (-1)^n \frac{(2n)!}{n!}\, {}_1F_1\left(-n; \frac{1}{2}; x^2\right)$$

$$\text{(b)}\quad H_{2n+1}(x) = (-1)^n\, 2\, \frac{(2n+1)!}{n!}\, x\, {}_1F_1\left(-n; \frac{3}{2}; x^2\right), \tag{78}$$

iar polinoamele Legendre satisfac relaţii de tipul:

$$\text{(a)}\quad P_n(\cos\varphi) = \frac{(2n-1)!!}{2^n\, n!}\, e^{\mp in\varphi}\, F\left(\frac{1}{2}, -n; \frac{1}{2} - n; e^{\pm 2i\varphi}\right)$$

$$\text{(b)}\quad P_n(\cos\varphi) = F\left(1+n, -n; 1; \sin^2\frac{\varphi}{2}\right)$$

$$\text{(c)}\quad P_n(\cos\varphi) = (-1)^n\, F\left(1+n, -n; 1; \cos^2\frac{\varphi}{2}\right)$$

$$\text{(d)}\quad P_n(\cos\varphi) = \cos^n\varphi\, F\left(-\frac{n}{2}, \frac{1}{2} - \frac{n}{2}; 1; -\tan^2\frac{\varphi}{2}\right).$$

BCUIAŞI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Dacă, în ecuaţia diferenţială (31), în locul numărului natural n, avem un parametru p oarecare, obţinem soluţiile liniar independente

$$u_1(x) = F\left(-p,\, p+1;\, 1;\, \frac{1-x}{2}\right) \tag{79}$$

care, pentru $x = \cos\varphi$, devine

$$P_p(x) = F\left(-p,\, p+1;\, 1;\, \sin^2\frac{\varphi}{2}\right), \tag{80}$$

şi

$$u_2(x) = \frac{\Gamma(p+1)\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}{2^{p+1}\,\Gamma\left(p+\frac{3}{2}\right)}\, x^{-p-1}\, F\left(\frac{p+2}{2}, \frac{p+1}{2}; \frac{p+3}{2}; \frac{1}{z^2}\right). \tag{81}$$

Soluţiile liniar independente (79) şi (81) se numesc funcţii Legendre respectiv de speţa întâi şi a doua. Dacă p nu este un număr întreg, atunci funcţia $u_1(x)$ prezintă singularităţi. Dacă $p = n = 0, 1, 2, \ldots$ atunci $u_1(x)$ se transformă într-un polinom Legendre $P_n(x)$. Pentru $p = -n$, avem relaţia $P_{-n-1}(x) = P_n(x)$.

Funcţia Γ care apare în formula (81) se defineşte prin:

$$\Gamma(z) = \int_0^\infty e^{-t}\, t^{z-1}\, dt\,, \quad Re(z) > 0\,, \tag{82}$$

satisface relaţia funcţională

$$\Gamma(z+1) = z\Gamma(z) \tag{83}$$

şi are valorile particulare

$$\begin{aligned} &\text{(a)} \quad \Gamma(n+1) = n!\,, \\ &\text{(b)} \quad \Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{(2n-1)!!}{2^n}\sqrt{\pi}\,, \\ &\text{(c)} \quad |\Gamma(1+i\beta)|^2 = \frac{\pi\beta}{\sinh\pi\beta}\,, \end{aligned} \tag{84}$$

unde n şi β sunt respectiv un număr întreg şi un număr real.

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

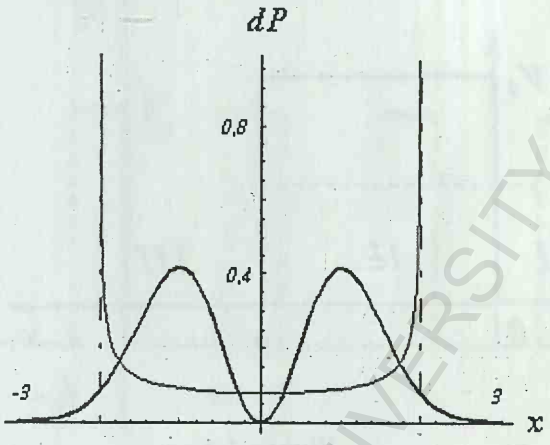

Figura 1.1

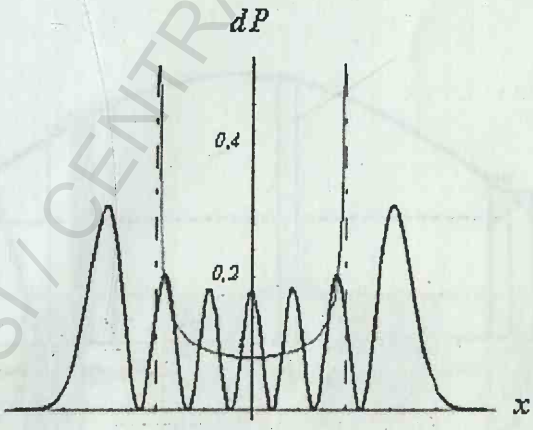

Figura 1.2

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

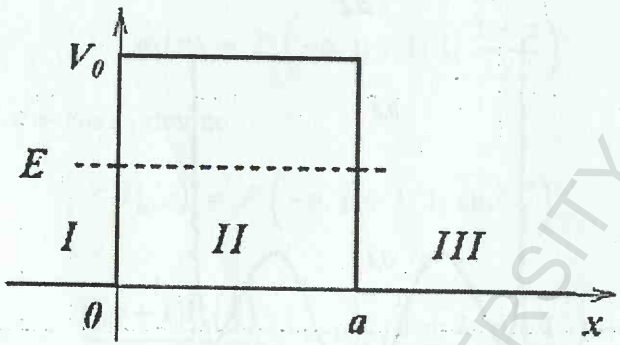

Figura 1.3

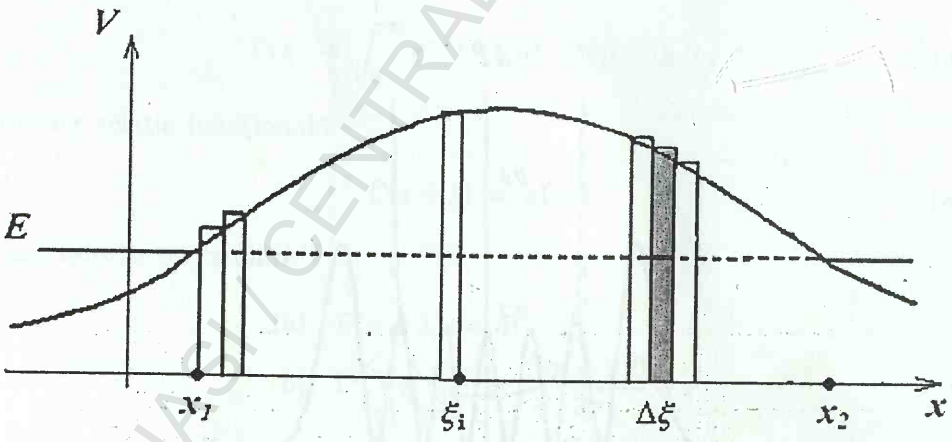

Figura 1.4

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

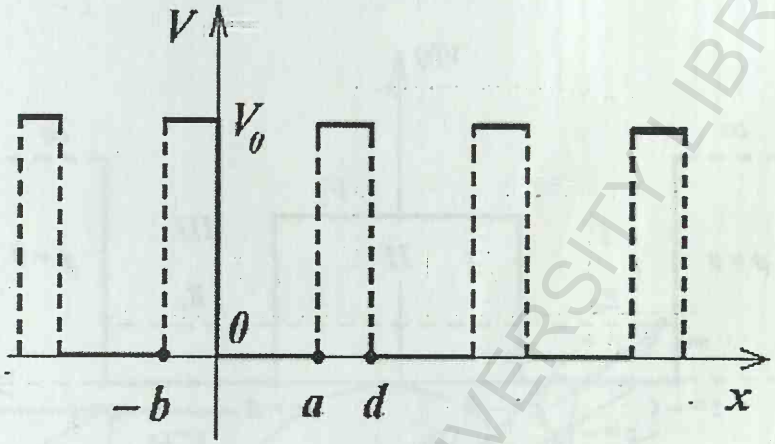

Figura 1.5

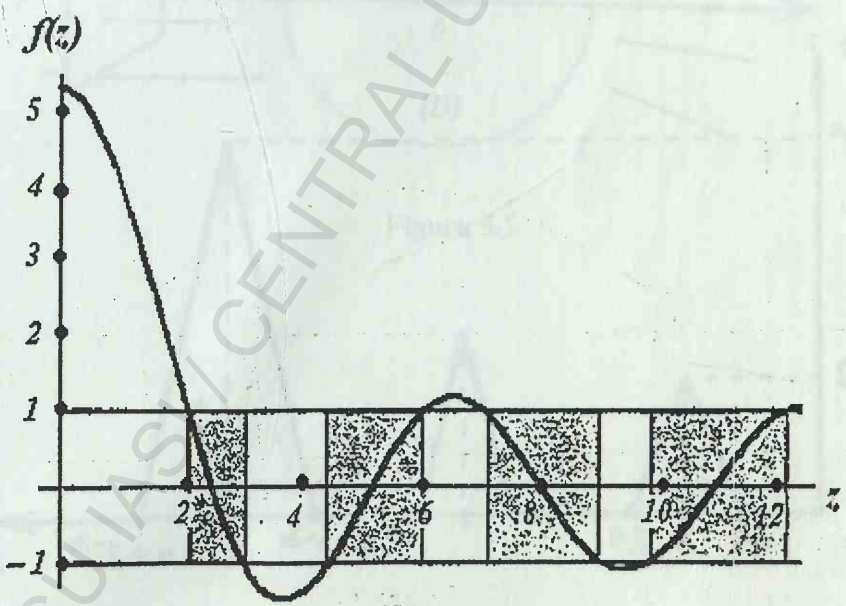

Figura 1.6

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

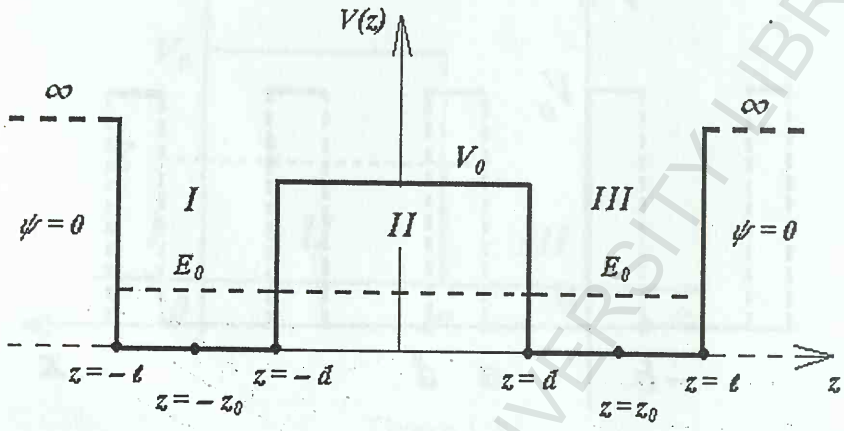

Figura 1.7

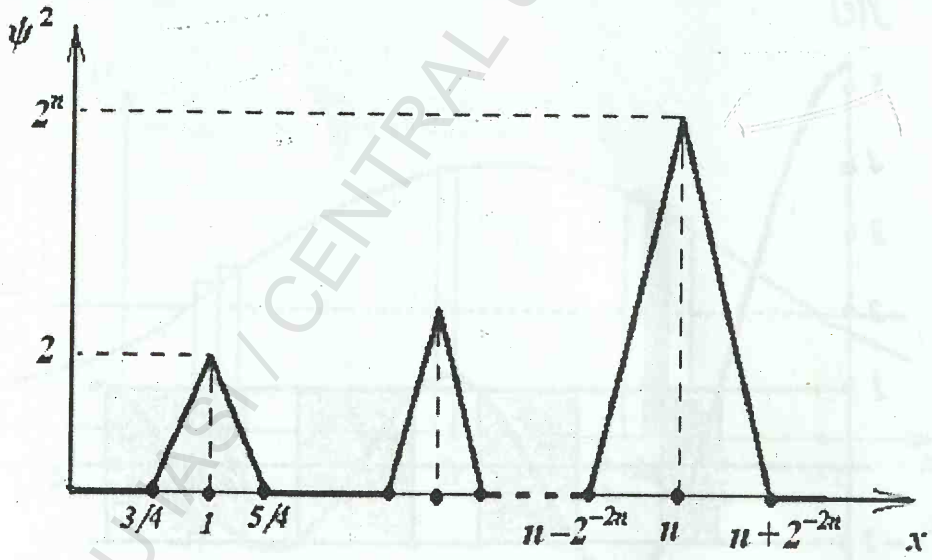

Figura 2.1

BCU LIBRARY / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

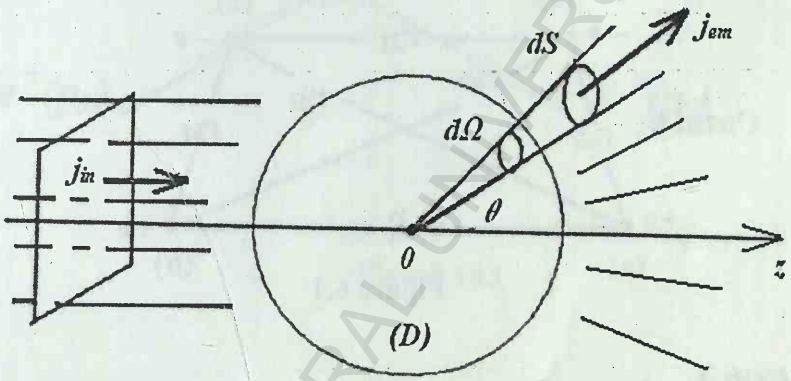

Figura 5.1

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

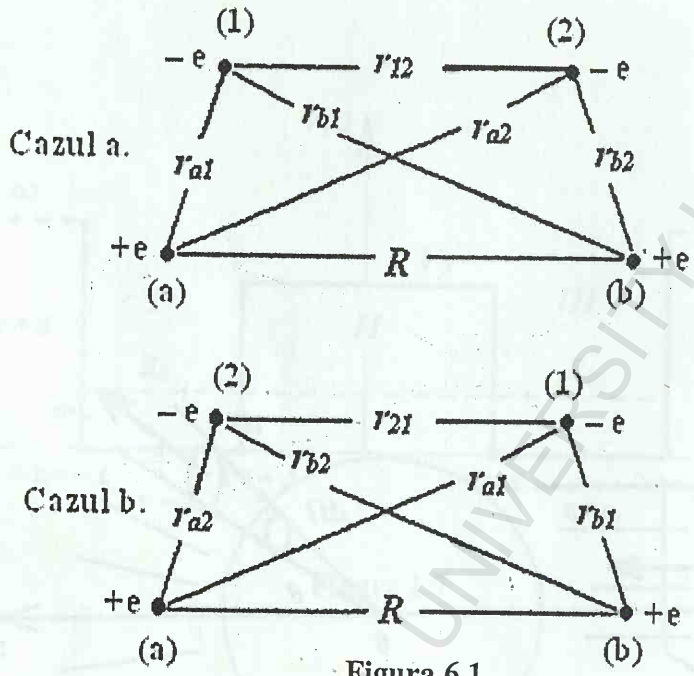

Figura 6.1

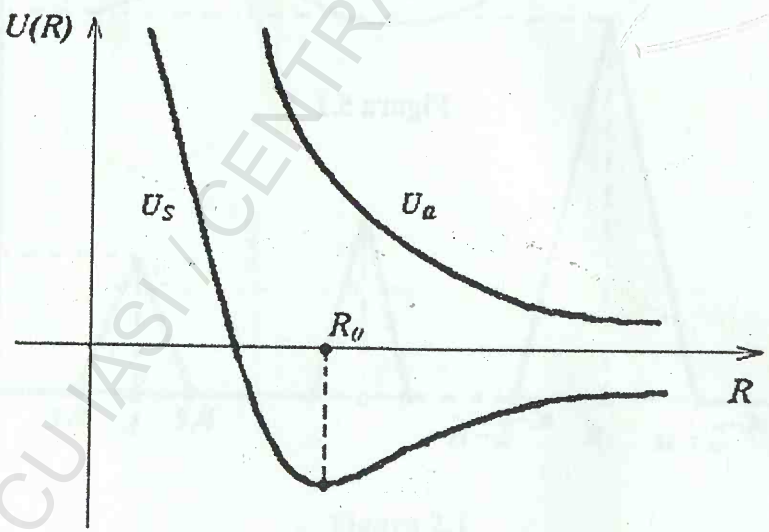

Figura 6.2

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

B.C.U. „M. EMINESCU" IAȘI
FILIALA

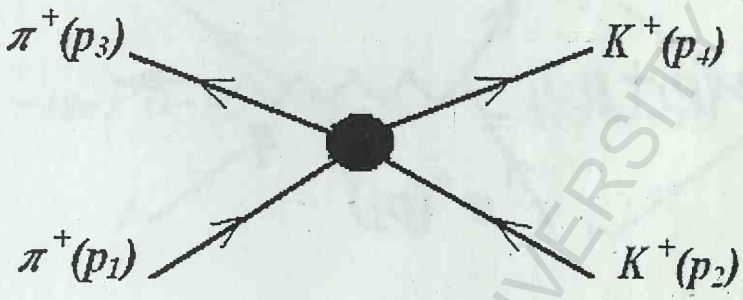

Figura 10.1

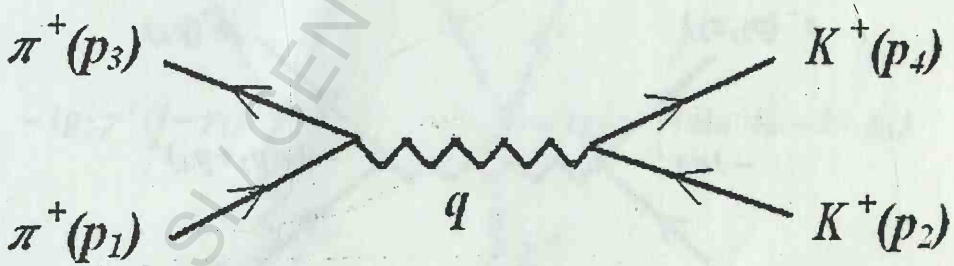

Figura 10.2

BCU IAȘI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

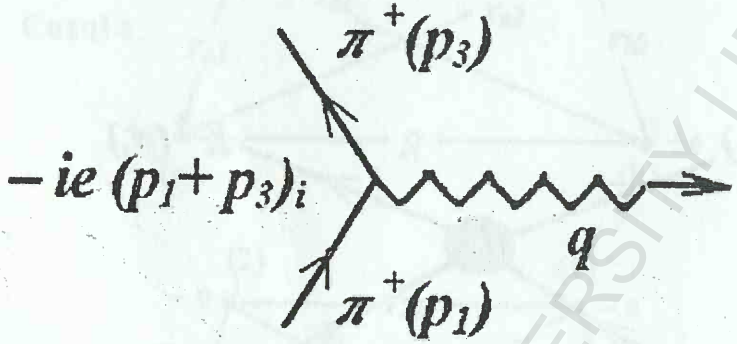

Figura 10.3

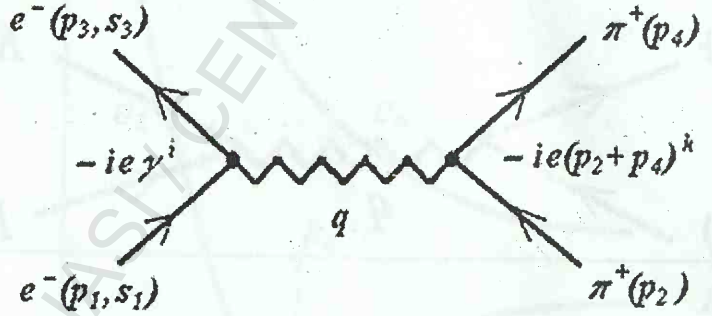

Figura 10.4

BCU IASI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

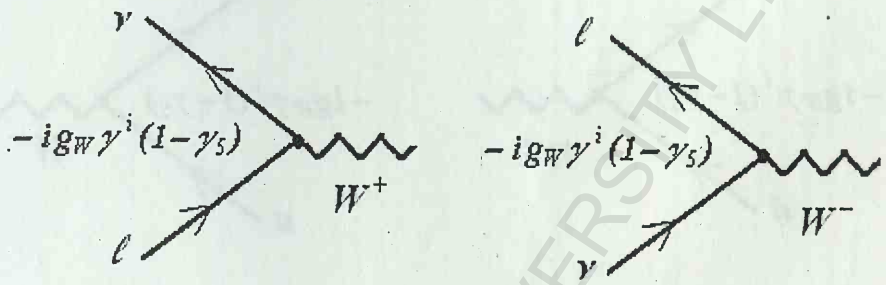

Figura 10.5

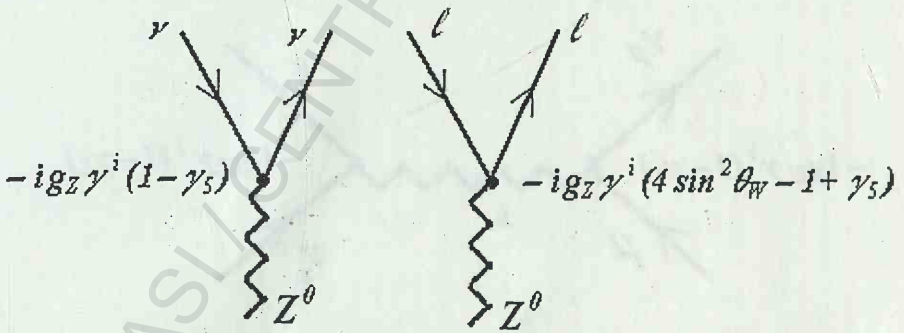

Figura 10.6

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

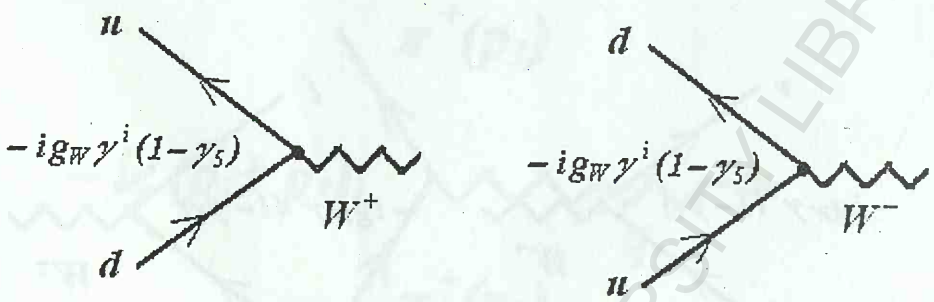

Figura 10.7

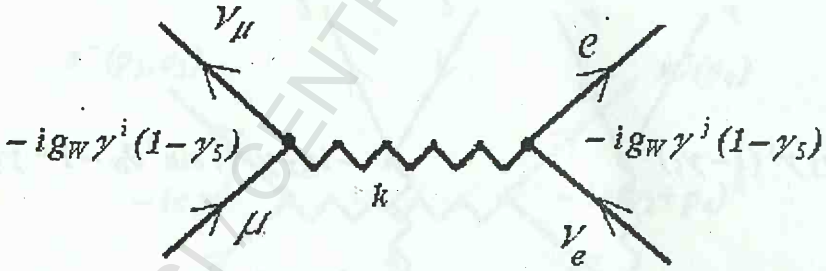

Figura 10.8

BCU IAȘI CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

Povestea despre cum au ajuns oamenii la descrierea complet neintuitivă a naturii, oferită de Mecanica Cuantică şi de Teoriile Cuantice de Câmp, este fascinantă dar foarte complicată; marea schimbare, de la imaginea clasică a mecanicii lui Newton la imaginea lumii cuantice, producându-se într-o succesiune de etape, prin contribuţiile remarcabile, uneori chiar împotriva propriilor convingeri, ale multor fizicieni de geniu.

(P.J.E. Peebles)

In istoria ştiinţei, au fost puţine evenimente care, în răstimpul scurt al unei generaţii, au avut astfel de consecinţe extraordinare ca descoperirea, de către Planck, a cuantei elementare de acţiune [...] Cine nu este şocat de teoria cuantică înseamnă că nu o înţelege.

(Niels Bohr)

Deşi simetriile sunt ascunse privirii noastre, ele există în natură, în stare latentă [...] poate, în decursul existenţei noastre, vom fi capabili să spunem din ce cauză ceea ce vedem în imensitatea universului de galaxii şi particule este, de fapt, inevitabil.

(Steven Weinberg)

BCU IASI / CENTRAL UNIVERSITY LIBRARY

9789737560612